

VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ
BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY



FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ
ÚSTAV FYZIKÁLNÍHO INŽENÝRSTVÍ
FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING
INSTITUTE OF PHYSICAL ENGINEERING

LOKALIZOVANÉ POVRCHOVÉ PLAZMONY: PRINCIPY A APLIKACE

LOCALIZED SURFACE PLASMONS: PRINCIPLES AND APPLICATION

DIPLOMOVÁ PRÁCE
MASTER'S THESIS

AUTOR PRÁCE
AUTHOR

Bc. MICHAL KVAPIL

VEDOUCÍ PRÁCE
SUPERVISOR

prof. RNDr. TOMÁŠ ŠIKOLA, CSc.

Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství

Ústav fyzikálního inženýrství

Akademický rok: 2009/10

ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE

student(ka): Kvapil Michal, Bc.

který/která studuje v **magisterském studijním programu**

obor: **Fyzikální inženýrství a nanotechnologie (3901T043)**

Ředitel ústavu Vám v souladu se zákonem č.111/1998 o vysokých školách a se Studijním a zkušebním řádem VUT v Brně určuje následující téma diplomové práce:

Lokalizované povrchové plazmony: principy a aplikace

v anglickém jazyce:

Localized Surface Plasmons: Principles and Application

Stručná charakteristika problematiky úkolu:

Pochopení procesů lokalizovaných povrchových plazmonů a jejich uplatnění v nanofotonice.

Cíle diplomové práce:

1. Proved'te rešeršní studii fyzikálních základů lokalizovaných povrchových plazmonů (LSP) a přípravy struktur pro jejich buzení s ohledem na jejich využití v oblasti nanofotoniky.
2. Proved'te počítačové simulace rezonančních vlastností plazmonických mikro a nanostruktur.
3. Navrhněte technologický postup výroby struktur uvedených v bodě č. 2 a metody ověření jejich rezonančních vlastností.

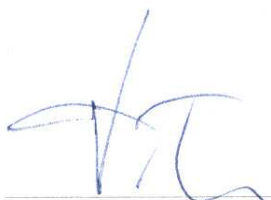
Seznam odborné literatury:

- [1] Stefan Maier, Plasmonics: Fundamentals and Applications, Springer Science Business Media LLC, 2007.
[2] C.F. Bohren, D. R. Huffman: Absorption and Scattering of Light by Small Particles. Wiley-VCH Verlag, 2004.

Vedoucí diplomové práce: prof. RNDr. Tomáš Šíkola, CSc.

Termín odevzdání diplomové práce je stanoven časovým plánem akademického roku 2009/10.

V Brně, dne 25.11.2009



prof. RNDr. Tomáš Šíkola, CSc.
Ředitel ústavu



doc. RNDr. Miroslav Doupovec, CSc.
Děkan fakulty

Abstrakt

Tato diplomová práce se zabývá plasmonickými nanostrukturami pro viditelnou, případně blízkou infračervenou, oblast elektromagnetického spektra. Nejdříve jsou připomenuty základní pojmy nutné k popisu vlastností plasmonických nanostruktur. Následně se práce zabývá rezonančními vlastnostmi zlatých nanoantén na skleněném substrátu a v přítomnosti nanokrystalického diamantu. Ke stanovení rezonančních vlastností a zesílení elektrického pole v okolí nanostruktur je užito FDTD simulací. Závěrem je uveden možný postup výroby antén a ověření jejich rezonančních vlastností.

Summary

The diploma thesis deals with plasmonic nanostructures for visible eventually near-infrared region of electromagnetic spectrum. At first, there are discussed basic terms which are necessary for description of plasmonic nanostructures and their properties. Then the resonant properties of gold nanoantennas on a fused silica substrate and in proximity of nanocrystalline diamond are addressed. FDTD simulations are used for an assesment of resonant properties and local electric field enhancement of these nanostructures. Possible manufacturing methods of the antennas and techniques for the measurement of their properties are mentioned at the end of the thesis.

Klíčová slova

plazmonika, plazmonické rezonanční antény, lokalizované povrchové plasmony, FDTD, simulace, nanokrystalický diamant

Keywords

plasmonics, plasmonic resonant antennas, localized surface plasmons, FDTD, simulations, nanocrystalline diamond

KVAPIL, M. *Lokalizované povrchové plazmony: principy a aplikace*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2010. 59 s. Vedoucí prof. RNDr. Tomáš Šíkola, CSc.

Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci vypracoval samostatně pod odborným vedením prof. RNDr. Tomáše Šikoly, CSc. a s použitím literatury, která je uvedena v příloženém seznamu.

Bc. Michal Kvapil

Děkuji prof. RNDr. Tomáši Šikolovi, CSc. za vedení při mé práci. Dále děkuji Ing. Radku Kalouskovi, Ph.D. a Ing. Lukáši Břínkovi za cenné připomínky a náměty. V neposlední řadě děkuji také celé mé rodině a přítelkyni za podporu během studia.

Bc. Michal Kvapil

Obsah

1	Úvod	3
2	Teorie elektromagnetického pole	5
2.1	Maxwellovy rovnice	5
2.2	Časově harmonické pole	6
2.3	Frekvenčně závislé veličiny	7
2.3.1	Fourierova transformace	7
2.3.2	Konvoluce lineárního systému	9
3	Optické vlastnosti látek	10
3.1	Lorentzův model	10
3.2	Drudeho model	11
3.3	Kramersovy-Kronigovy relace	12
3.4	Sellmeierova rovnice	14
4	Povrchové plazmonové polaritony na rozhraní vodiče a dielektrika	15
4.1	Vlnová rovnice	15
4.2	Elektromagnetická vlna na rozhraní prostředí	16
4.3	Povrchové plazmonové polaritony	18
4.4	PPP na multivrstvě dielektrikum-kov-dielektrikum	20
4.5	Lokalizované povrchové plazmony	22
4.5.1	Kvazistatická aproximace rozptylu světla na nanočástici	23
5	Simulační metoda FDTD	27
5.1	O metodě FDTD	27
5.2	CW normování	28
6	Simulace a výsledky	30
6.1	Volba materiálu	30
6.2	Nastavení simulací	30
6.3	Volba okrajových podmínek	31
6.4	Rezonanční vlastnosti zlatých antén na skleněném substrátu	35
6.4.1	Vliv délky antény L	35
6.4.2	Vliv šířky antény W a výšky antény H	38
6.5	Nanokrystalický diamant v okolí antén	42
6.5.1	Nanokrystalický diamant	42
6.5.2	Dielektrická funkce nanokrystalického diamantu	42
6.5.3	Tenká vrstva diamantu	43
6.5.4	Nanotyče z NCD v okolí antény	49
7	Postup výroby a metoda měření	53
7.1	Postup výroby plazmonických nanostruktur	53
7.2	Metoda pro měření rezonančních vlastností	54
8	Závěr	56

OBSAH

Literatura **57**

Použité zkratky **59**

1. Úvod

Plazmonika jako obor, který se zabývá interakcí elektromagnetického záření se strukturami, jejichž rozměry jsou menší nebo srovnatelné s vlnovou délkou elektromagnetického záření, prodělala v poslední desítce let obrovský rozvoj. Nicméně jevy, na kterých plazmonika staví, jsou známy i více než jedno století.

Už na přelomu 19. a 20. století klasici fyziky, jakými jsou Sommerfeld, Zenneck, Mie a další, popsali jevy, které dnes označujeme jako povrchové plazmonové polaritony a lokalizované povrchové plazmony. Nicméně tyto jevy byly po dlouhou dobu známy jen úzkému okruhu odborníků, neboť neexistovalo žádné jejich praktické využití; snad kromě jediného, známého už po staletí. Již staří Římané věděli, že velmi malé částčky zlata nebo stříbra, které přidávají do skla při jeho výrobě, způsobují unikátní optické vlastnosti takového skla. Tato vlastnost kovových částic byla využívána téměř dva tisíce let, než Mie vysvětlil, co způsobuje tuto zvláštní schopnost zlatých a stříbrných částic.

Dnes, sto let po vzniku tzv. Mieho teorie, nácházejí jevy popsané Sommerfeldem, Zenneckem a Miem díky bouřlivému rozvoji nanotechnologií bohaté uplatnění v praxi a je jim přepovídaná i velká budoucnost.

Povrchové plazmonové polaritony jsou povrchové elektromagnetické vlny, které se po vybuzení šíří po rozhraní kovu a dielektrika. Existují struktury pro navazování světla na povrch kovu a jeho přeměnu na plazmonové polaritony. Stejně tak existují plazmonové vlnovody, které vedou signál v podobě plazmonových polaritonů po svém povrchu, a jejichž příčné rozměry jsou hluboko pod difrakčním limitem světla. Plazmonové polaritony by tak jednou mohly způsobit doslova revoluci ve výpočetní technice. Pokud bychom dokázali jejich vlastnosti dobře ovládat a miniaturizovat struktury pro jejich buzení a šíření, mohli bychom se jednoho dne dočkat integrovaného obvodu, v němž by informace nebyly přenášeny elektrony, ale plazmony. Tím by se výkon výpočetní techniky zvedl o několik řádů. Výkon výpočetní techniky je úměrný rychlosti zpracování informace, tedy frekvenci, se kterou počítačové čipy pracují. Současné polovodičové čipy se pracovní frekvencí v jednotkách gigahertz blíží svému maximu, ovšem optické čipy by mohly pracovat na frekvencích v řádech stovek terahertz.

Lokalizovaná plazmonová rezonance, jev zodpovědný za ony unikátní vlastnosti skla toliko ceněné starými Římany, nachází své uplatnění ve vědecké praxi již po více než 30 let. Důsledkem vzniku lokalizovaných plazmonů v kovových nanočásticích je zesílení lokálního elektrického pole v okolí nanočástice. Tohoto jevu je hojně využíváno především ve spektroskopii. Například při povrchem zesílené ramanovské spektroskopii se do zkoumaného vzorku přidávají nanočástice zlata nebo stříbra, které samy nevykazují Ramanův rozptyl, a které zesilují ramanovský signál od zkoumaného vzorku až o 14 řádů. Takovýto faktor zesílení signálu tak výrazně zvyšuje detekční limity ramanovské spektroskopie. Při hrotem zesílené ramanovské spektroskopii, kdy je do těsné blízkosti vzorku umístěn hrot, na jehož konci se nachází nanočástice, se vlivem plazmonové rezonance výrazně zvyšuje prostorové rozlišení této spektroskopické metody.

A nezapomínejme ani na metamateriály. Těmto uměle vytvořeným materiálům se záporným indexem lomu je také předpovídaná velká budoucnost. Konstrukce a aplikace tzv. Veselagových čoček, předpovězených již v 60. letech 20. století, by způsobily zmenšení vad optického zobrazení. Další, hlavně mezi laickou veřejností populární, aplikací metamateriálů je neviditelnost. Metamateriál v okolí určitého objektu může „ohnout“ paprsky světla

kolem tohoto objektu tak, že tyto paprsky na objekt vůbec nedopadají a objekt se tak pro určitý interval vlnových délek jeví jako neviditelný.

Cílem této práce je pomocí simulací určit rezonanční vlastnosti zlatých nanoantén na skleněném substrátu a vliv přítomnosti nanokrystalického diamantu na tyto vlastnosti. V prvních kapitolách této práce popisujeme elektromagnetické pole a optické vlastnosti látek. Kapitola 4 se věnuje povrchovým plazmonovým polaritonům. Numerická metoda použitá v simulacích je nastíněna v kapitole 5. Šestá kapitola se věnuje simulacím zlatých nanoantén a jejich výsledkům. V sedmé kapitole je uveden možný postup při výrobě antén a při měření rezonančních vlastností těchto antén.

2. Teorie elektromagnetického pole

2.1. Maxwellovy rovnice

Rozptyl a absorpci světla na strukturách menších než je vlnová délka světla lze vysvětlit pomocí teorie elektromagnetismu. Všechny elektromagnetické jevy lze popsat souborem několika vztahů, které jsou označovány jako Maxwellovy rovnice [2], [8], [14]:

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho_f, \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad (2.2)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (2.3)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \vec{J}_f + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}. \quad (2.4)$$

Tyto makroskopické rovnice vzájemně propojují elektrickou indukci \vec{D} , magnetickou indukci \vec{B} , intenzitu elektrického pole \vec{E} a intenzitu magnetického pole \vec{H} prostřednictvím hustoty volného náboje ρ_f a hustoty volného proudu \vec{J}_f .

Tato čtyři pole jsou dále mezi sebou svázána pomocí materiálových vztahů pro polarizaci \vec{P} a magnetizaci \vec{M}

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P}, \quad (2.5)$$

$$\vec{H} = \frac{1}{\mu_0} \vec{B} - \vec{M}, \quad (2.6)$$

kde ε_0 a μ_0 jsou elektrická permitivita¹ a magnetická permeabilita² vakua.

Makroskopické Maxwellovy rovnice (2.1)-(2.6) jsou dále doplněny třemi mikroskopickými rovnicemi

$$\vec{J}_f = \sigma \vec{E}, \quad (2.7)$$

$$\vec{B} = \mu_0 \mu_r \vec{H}, \quad (2.8)$$

$$\vec{P} = \varepsilon_0 \chi \vec{E}, \quad (2.9)$$

kde σ je elektrická vodivost, μ_r je relativní permeabilita a χ je elektrická susceptibilita. Dosazením (2.9) do (2.5) dospějeme ke vztahu

$$\vec{D} = \varepsilon_0 (1 + \chi) \vec{E} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \vec{E}, \quad (2.10)$$

kde $\varepsilon_r = 1 + \chi$ je relativní permitivita, také nazývaná dielektrická funkce.

¹ $\varepsilon_0 \approx 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ F} \cdot \text{m}^{-1}$

² $\mu_0 \approx 1,257 \cdot 10^{-6} \text{ H} \cdot \text{m}^{-1}$

2.2. ČASOVĚ HARMONICKÉ POLE

Koeficienty σ , μ_r a χ jsou materiálové charakteristiky. Vztahy (2.7)-(2.9) popisují situaci, kdy koeficienty σ , μ_r a χ jsou nezávislé na elektromagnetickém poli, na místě a na směru v materiálu. Materiál tedy musí být lineární, homogenní a izotropní.

Ze vztahu mezi polarizací \vec{P} a intenzitou elektrického pole \vec{E} (2.9) vidíme, že v těchto materiálech elektrická susceptibilita udává, jak snadno se materiál vlivem vnějšího elektrického pole polarizuje. Ze vztahu (2.10) je zřejmá spojitost mezi elektrickou susceptibilitou χ , a tedy také polarizací \vec{P} , a relativní permitivitou ϵ_r .

Na rozhraní dvou různých prostředí platí tyto okrajové podmínky [6], [8]:

$$(\vec{D}_2 - \vec{D}_1) \cdot \vec{n} = \varrho_f, \quad (2.11)$$

$$(\vec{B}_2 - \vec{B}_1) \cdot \vec{n} = 0, \quad (2.12)$$

$$\vec{n} \times (\vec{E}_2 - \vec{E}_1) = \vec{0}, \quad (2.13)$$

$$\vec{n} \times (\vec{H}_2 - \vec{H}_1) = \vec{K}_f, \quad (2.14)$$

kde ϱ_f je volný náboj, \vec{K}_f je volný proud na rozhraní mezi prostředními a \vec{n} je jednotkový vektor, kolmý k rozhraní mezi prostředními.

2.2. Časově harmonické pole

Obecné časově harmonické pole \vec{F} lze popsat vztahem

$$\vec{F} = \vec{A} \cos \omega t + \vec{B} \sin \omega t, \quad (2.15)$$

kde ω je úhlová frekvence. Reálné vektorové amplitudy \vec{A} a \vec{B} jsou na čase nezávislé, ale mohou záviset na poloze. Povšimněme si, že časově harmonické pole \vec{F} může být vyjádřeno jako reálná část komplexního vektoru $\vec{F} = \Re\{\vec{F}_c\}$, kde

$$\vec{F}_c = \vec{C} \exp(-i\omega t), \quad \vec{C} = \vec{A} + i\vec{B}. \quad (2.16)$$

Vektor \vec{F}_c je komplexní reprezentací reálného pole \vec{F} . Jsou-li všechny operace s tímto harmonickým polem lineární, pak je výhodnější pracovat s jeho komplexní reprezentací. Nechť \mathcal{Q} je lineární operátor. Operátor \mathcal{Q} můžeme aplikovat na reálné vektorové pole (2.15) tak, že jej aplikujeme na komplexní reprezentaci (2.16) tohoto pole a za výsledek budeme následně chápat pouze reálnou část

$$\mathcal{Q}\vec{F} = \mathcal{Q}\Re\{\vec{F}_c\} = \Re\{\mathcal{Q}\vec{F}_c\} \quad (2.17)$$

Vektorové pole (2.15) může být také vyjádřeno jako $\vec{F} = \Re\{\vec{F}_c^*\}$, kde $\vec{F}_c^* = \vec{C}^* \exp(i\omega t)$ a \vec{C}^* označuje člen komplexně sdružený k \vec{C} . Tedy v komplexní reprezentaci máme dvě možnosti volby faktoru časové závislosti – buď $\exp(i\omega t)$ nebo $\exp(-i\omega t)$. Nezáleží na tom, kterou možnost zvolíme, fyzikální veličiny budou vždy reálné. Nicméně jakmile je jednou znaménková konvence zvolena, musí být shodně užívána v celé práci. Jako faktor popisující časovou závislost pole budeme nadále používat $\exp(-i\omega t)$.

2. TEORIE ELEKTROMAGNETIKÉHO POLE

Předpokládáme-li pro všechna pole časovou závislost $\exp(-i\omega t)$ a dosadíme-li vztahy (2.7)-(2.9) do Maxwellových rovnic (2.1)-(2.4), dostaneme

$$\nabla \cdot (\varepsilon \vec{E}) = 0, \quad (2.18)$$

$$\nabla \cdot \vec{H} = 0, \quad (2.19)$$

$$\nabla \times \vec{E} = i\omega\mu\vec{H}, \quad (2.20)$$

$$\nabla \times \vec{H} = -i\omega\varepsilon\vec{E}, \quad (2.21)$$

kde μ je permabilita materiálu zavedená jako součin permability vakua μ_0 a relativní permability materiálu μ_r . Komplexní permitivitu ε lze vyjádřit jako

$$\varepsilon = \varepsilon_0(1 + \chi) + i\frac{\sigma}{\omega}. \quad (2.22)$$

Ke vztahu (2.22) pro komplexní permitivitu jsme dospěli následovně. Do vztahu (2.4) pro Ampérův-Maxwellův zákon dosadíme vztahy (2.7), (2.9) a (2.10), a tím získáme vztah

$$\nabla \times \vec{H} = \sigma\vec{E} + \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_0\vec{E} + \varepsilon_0\chi\vec{E}) \quad (2.23)$$

Provedením parciální derivace podle času t a následnou úpravou dostaneme vztah (2.22) popisující komplexní permitivitu ε .

2.3. Frekvenčně závislé veličiny

V kapitole 2.2 odvozená komplexní permitivita ε je obecně závislá na frekvenci³ ν . Frekvence ν vystupuje ve vztahu (2.22) přímo (prostřednictvím ω) a navíc i vodivost σ a susceptibilita χ jsou funkcemi frekvence. K tomu, abychom zjistili, jak daný materiál reaguje na záření o konkrétní vlnové délce, je třeba použít matematického aparátu označovaného jako Fourierova transformace.

2.3.1. Fourierova transformace

Fourierova transformace je speciálním případem integrální transformace. Dle [12](str. 7) je Fourierova transformace téměř výlučně definována s použitím tří nenulových konstant A , B a k . Definujme tedy Fourierovu transformaci $\text{FT}\{f(\vec{x})\} = \mathcal{F}(\vec{X})$ funkce $f(\vec{x})$ a inverzní Fourierovu transformaci $\text{FT}^{-1}\{\mathcal{F}(\vec{X})\} = f(\vec{x})$ jako integrály

$$\text{FT}\{f(\vec{x})\} = \mathcal{F}(\vec{X}) = A^N \int \cdots \int_{-\infty}^{\infty} f(\vec{x}) \exp(-ik\vec{X} \cdot \vec{x}) d^N \vec{x}, \quad (2.24)$$

$$\text{FT}^{-1}\{\mathcal{F}(\vec{X})\} = f(\vec{x}) = B^N \int \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}(\vec{X}) \exp(ik\vec{X} \cdot \vec{x}) d^N \vec{X}. \quad (2.25)$$

³ $\omega = 2\pi\nu$

2.3. FREKVENČNĚ ZÁVISLÉ VELIČINY

Přitom se předpokládá, že funkce $f(\vec{x})$ a $\mathcal{F}(\vec{X})$ jsou absolutně integrovatelné, po částech hladké, komplexní funkce reálných proměnných \vec{x}, \vec{X} , jež náležejí do N -rozměrného prostoru. Konstanty A, B se vždy volí reálné a kladné a s konstantou k jsou svázány podmínkou

$$AB = \frac{|k|}{2\pi} \quad (2.26)$$

V různých oborech, v nichž se užívá Fourierovy transformace se konstanty A, B a k volí různě. Budeme se držet zvyklosti fyziky pevných látek a zvolíme tyto konstanty následovně: $A = 1, B = 1/2\pi$ a $k = 1$.

Uvažujme reálnou funkci závislou na čase $f(t)$. Fourierova transformace $\mathcal{F}(\omega)$ funkce $f(t)$ je dle [2](str. 15) dána integrálem⁴

$$\text{FT}\{f(t)\} = \mathcal{F}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \exp(-i\omega t) dt. \quad (2.27)$$

Inverzní Fourierova transformace je definována integrálem

$$\text{FT}^{-1}\{\mathcal{F}(\omega)\} = f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{F}(\omega) \exp(i\omega t) d\omega. \quad (2.28)$$

Provedeme-li Fourierovu transformaci Maxwellových rovnic (2.1)-(2.4) pro prostředí bez volných nábojů ($\rho_f = 0$) a předpokládáme-li že pořadí integrování a derivování lze zaměnit, pak dostáváme

$$\nabla \cdot \vec{\mathcal{D}}(\omega) = 0, \quad (2.29)$$

$$\nabla \cdot \vec{\mathcal{B}}(\omega) = 0, \quad (2.30)$$

$$\nabla \times \vec{\mathcal{E}}(\omega) = i\omega \vec{\mathcal{B}}(\omega), \quad (2.31)$$

$$\nabla \times \vec{\mathcal{H}}(\omega) = \vec{\mathcal{J}}_f - i\omega \vec{\mathcal{D}}(\omega), \quad (2.32)$$

kde $\vec{\mathcal{D}}(\omega), \vec{\mathcal{B}}(\omega), \vec{\mathcal{E}}(\omega), \vec{\mathcal{H}}(\omega)$ a $\vec{\mathcal{J}}_f(\omega)$ jsou Fourierovy transformace elektrické indukce \vec{D} , magnetické indukce \vec{B} , elektrické intenzity \vec{E} , magnetické intenzity \vec{H} a hustoty volných proudů \vec{J}_f .

I mezi Fourierovými transformacemi uvedených polí platí vztahy obdobné vztahům (2.7)-(2.9), tedy

$$\vec{\mathcal{J}}_f(\omega) = \sigma(\omega) \vec{\mathcal{E}}(\omega), \quad (2.33)$$

$$\vec{\mathcal{B}}(\omega) = \mu(\omega) \vec{\mathcal{H}}(\omega), \quad (2.34)$$

$$\vec{\mathcal{P}}(\omega) = \varepsilon_0 \chi(\omega) \vec{\mathcal{E}}(\omega), \quad (2.35)$$

kde $\vec{\mathcal{P}}(\omega)$ je Fourierova transformace polarizace \vec{P} . V rovnicích (2.33)-(2.35) jsou $\vec{\mathcal{J}}_f(\omega), \vec{\mathcal{B}}(\omega)$ a $\vec{\mathcal{P}}(\omega)$ vyjádřeny jako součin Fourierových transformací.

⁴proměnné t, ω a konstantu k dosadíme do jádra Fourierovy transformace a dostaneme tak $\exp(\pm i k \vec{X} \cdot \vec{x}) = \exp(\pm i \omega t)$

2.3.2. Konvoluce lineárního systému

Vztahy (2.33)-(2.35) vyjadřují součin Fourierových transformací. Podívejme se blíže například na vztah (2.35) pro Fourierovu transformaci polarizace. Až na konstantu ε_0 je $\vec{P}(\omega)$ dáno jako součin $\chi(\omega)$ a $\vec{E}(\omega)$. Takovýto součin Fourierových transformací je dle konvolučního teorému [12](str. 77-81) úměrný konvoluci funkcí $\chi(t)$ a $\vec{E}(t)$.

Obečně se konvolucí $f(t) = f_1(t) * f_2(t)$ dvou funkcí $f_1(t)$ a $f_2(t)$ rozumí integrál

$$f(t) = f_1(t) * f_2(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f_1(t') f_2(t - t') dt'. \quad (2.36)$$

Dále dle [12](str. 79) platí mezi Fourierovou transformací a konvolucí vztahy

$$FT\{f_1(t) * f_2(t)\} = \frac{1}{A}[(F_1(\omega)F_2(\omega))], \quad (2.37)$$

$$FT\{f_1(t)f_2(t)\} = B[F_1(\omega) * F_2(\omega)]. \quad (2.38)$$

Podívejme se zpět na vztah (2.35) a aplikujme na něj konvoluční teorém. Dle [2](str. 17) dospějeme k následujícímu vztahu

$$\vec{P}(t) = \varepsilon_0 \int_{-\infty}^{\infty} G(t - t') \vec{E}(t') dt, \quad (2.39)$$

kde

$$G(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \chi(\omega) \exp(-i\omega t) d\omega. \quad (2.40)$$

Tedy ze vztahů (2.39) a (2.40) plyne, že polarizace \vec{P} v čase t závisí na elektrickém poli \vec{E} ve všech předchozích časech t' . Pro ozřejmění si představme, že na materiál působí konstantní vnější elektrické pole. Materiál se postupně polarizuje, až po určité době je zcela polarizován a jeho polarizace přestane růst. Pokud v tomto stavu najednou vypneme vnější elektrické pole, polarizace materiálu nebude okamžitě nulová, ale s rostoucím časem bude polarizace k nule postupně klesat. Tedy polarizace materiálu není dána okamžitým stavem elektrického pole.

Podobné vztahy jako (2.39) a (2.40) lze aplikací konvolučního teorému odvodit také pro \vec{B} a \vec{J}_f ze vztahů (2.33) a (2.34).

3. Optické vlastnosti látek

Optickými vlastnostmi látek chápeme, jak látky ovlivňují šíření elektromagnetické vlny. K popisu optických vlastností látek se obvykle užívá komplexního indexu lomu $N = n + ik$ a komplexní dielektrické funkce (také známé jako relativní permitivita) $\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon''$. Tyto dvě veličiny jsou svázány pomocí vztahů

$$N = n + ik = \sqrt{\varepsilon} = \sqrt{\varepsilon' + i\varepsilon''}, \quad (3.1)$$

$$\varepsilon' = n^2 - k^2, \quad (3.2)$$

$$\varepsilon'' = 2nk, \quad (3.3)$$

$$n = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon'^2 + \varepsilon''^2} + \varepsilon'}{2}}, \quad (3.4)$$

$$k = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon'^2 + \varepsilon''^2} - \varepsilon'}{2}}. \quad (3.5)$$

Veličiny N a ε popisují stejné optické vlastnosti látky. Avšak při popisu některých optických jevů bývá často preferována jedna z nich. Například k vyjádření reflexe nebo transmise elektromagnetického záření na rozhraní dvou prostředí používáme komplexního indexu lomu N , stejně tak k popisu šíření elektromagnetické vlny prostředím, kde n vystupuje ve vztahu pro fázovou rychlost vlny a k popisuje útlum vlny během jejího šíření. Naopak k popisu rozptylu elektromagnetického záření na částicích, jejichž velikost je malá ve srovnání s vlnovou délkou záření, nebo při popisu mikroskopických mechanismů zodpovědných za optické jevy používáme zpravidla komplexní dielektrické funkce ε .

K popisu interakce elektromagnetického záření s látkou bylo vytvořeno několik klasických i kvantově mechanických modelů. Přestože klasické modely nevyužívají zákonů kvantové fyziky, jsou pro naprostou většinu aplikací dostačující. Optické vlastnosti dielektrik popisuje Lorentzův model, optické vlastnosti kovů jsou popsány Drudeho modelem.

3.1. Lorentzův model

Lorentzův model popisuje optické vlastnosti dielektrik. Vychází z představy, že elektron je k atomovému jádru vázán přitažlivou silou, jejíž velikost je úměrná výchylce z rovnovážné polohy. Podle tohoto modelu chápeme látku jako soubor stejných, nezávislých, izotropních harmonických oscilátorů. Na oscilátor o hmotnosti m a náboji e působí vratná síla $K\vec{x}$, kde K je tuhost a \vec{x} výchylka z rovnovážné polohy. Dále na oscilátor působí tlumící síla $b\dot{\vec{x}}$, kde b je konstanta tuhosti, a vynucující síla, která je vyvolána vnějším elektrickým polem \vec{E} . Pohybová rovnice takového oscilátoru má pak tvar

$$m\ddot{\vec{x}} + b\dot{\vec{x}} + K\vec{x} = -e\vec{E}. \quad (3.6)$$

Uvážíme-li, že elektrické pole \vec{E} je harmonické, tedy $\vec{E}(t) = \vec{E}_0 \exp(-i\omega t)$, pak dospějeme ke vztahu pro výchylku elektronu z rovnovážné polohy

$$\vec{x}(t) = \frac{-(e/m)}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \vec{E}(t), \quad (3.7)$$

3. OPTICKÉ VLASTNOSTI LÁTEK

kde $\omega_0^2 = K/m$ a $\gamma = b/m$. Jsou-li kmity elektronů tlumené, tj. je-li $\gamma \neq 0$, pak je faktor úměrnosti mezi výchylkou $\vec{x}(t)$ a elektrickým polem $\vec{E}(t)$ komplexní, to znamená, že výchylka $\vec{x}(t)$ a elektrické pole $\vec{E}(t)$ obecně nejsou ve fázi.

Elektrické pole $\vec{E}(t)$ vychyluje elektrony z rovnovážné polohy a dielektrikum se tak polarizuje. Dipólový moment jednoho oscilátoru je $\vec{p} = -e\vec{x}$. Je-li \mathcal{N} počet oscilátorů v jednotkovém objemu, potom polarizace¹ \vec{P} je $\mathcal{N}\vec{p} = -\mathcal{N}e\vec{x}$. Odtud dosazením vztahu (3.7) dospějeme ke vztahu

$$\vec{P} = \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \varepsilon_0 \vec{E}, \quad (3.8)$$

kde $\omega_p = \sqrt{\mathcal{N}e^2/m\varepsilon_0}$ je tzv. plazmová frekvence. Srovnáním vztahu (3.8) s (2.9) získáme

$$\chi(\omega) = \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}. \quad (3.9)$$

Vydeme-li ze vztahu (2.10) a dosadíme-li do něj (3.9), dospějeme k dielektrické funkci pro náš systém jednoduchých harmonických oscilátorů

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \chi(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}. \quad (3.10)$$

Reálná ε' a imaginární složka ε'' dielektrické funkce ε pak má tvar

$$\varepsilon'(\omega) = 1 + \chi'(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2(\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2}, \quad (3.11)$$

$$\varepsilon''(\omega) = \chi''(\omega) = \frac{\omega_p^2\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2}. \quad (3.12)$$

3.2. Drudeho model

Drudeho model popisuje optické vlastnosti kovů. Je to v podstatě zvláštní případ Lorentzova modelu. Model předpokládá, že elektrony nejsou vázány k atomům a v reakci na vnější elektrické pole se mohou v látce volně pohybovat. Pohybová rovnice takovýchto elektronů je pak stejná jako v případě Lorentzova modelu (3.6), pouze je vypuštěn člen $K\vec{x}$ představující pružnou vazbu elektronu k jádru atomu, K je tedy nulové. Pohybová rovnice Drudeho modelu má tedy tvar

$$m\ddot{\vec{x}} + m\gamma\dot{\vec{x}} = -e\vec{E}. \quad (3.13)$$

Uvažujeme-li stejně jako v případě Lorentzova modelu, že vnější elektrické pole je harmonické, tedy $\vec{E}(t) = \vec{E}_0 \exp(-i\omega t)$, dospějeme k závislosti posunutí elektronu na čase ve tvaru

$$\vec{x}(t) = \frac{-(e/m)}{\omega^2 + i\gamma\omega} \vec{E}(t), \quad (3.14)$$

¹dipólový moment v jednotkovém objemu

3.3. KRAMERSOVY-KRONIGOVY RELACE

Vlivem vnějšího elektrického pole dochází v látce k posuvu elektronů vzhledem ke kladným jádrům atomů a látka se polarizuje. Polarizace \vec{P} je pak vyjádřena jako

$$\vec{P} = -\mathcal{N}e\vec{x} = \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega}\vec{E}, \quad (3.15)$$

kde \mathcal{N} je objemová hustota volných elektronů.

Stejným postupem jako v případě Lorentzova modelu pak dospějeme k dielektrické funkci ve tvaru

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega}. \quad (3.16)$$

Dielektrická funkce $\varepsilon(\omega)$ je funkcí komplexní. Její reálná a imaginární část jsou ve tvaru

$$\varepsilon'(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \gamma^2}, \quad (3.17)$$

$$\varepsilon''(\omega) = \frac{\omega_p^2\gamma}{\omega(\omega^2 + \gamma^2)}. \quad (3.18)$$

Z rozboru pohybu plynu volných elektronů se ukazuje, že konstanta tlumení γ souvisí s relaxačním časem² τ vztahem $\gamma = 1/\tau$ [2](str. 254), [14](str. 12). Dosadíme-li za γ do vztahů (3.17) a (3.18), můžeme složky dielektrické funkce ε psát ve tvaru

$$\varepsilon'(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2\tau^2}{1 + \omega^2\tau^2}, \quad (3.19)$$

$$\varepsilon''(\omega) = \frac{\omega_p^2\tau}{\omega(1 + \omega^2\tau^2)}. \quad (3.20)$$

Ač by se to mohlo z předchozího popisu zdát, reálná ε' a imaginární složka ε'' dielektrické funkce ε nejsou nezávislé. Jsou vzájemně svázány tzv. Kramersovými-Kronigovými relacemi.

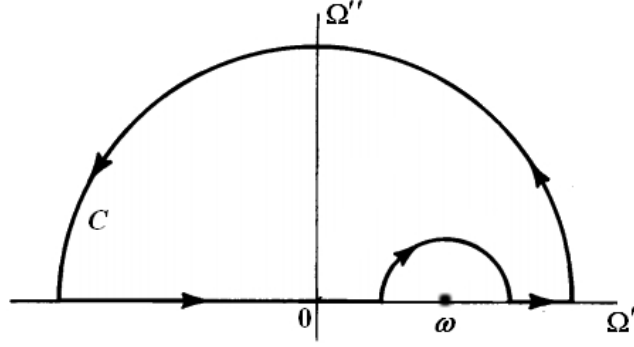
3.3. Kramersovy-Kronigovy relace

Jako Kramersovy-Kronigovy relace bývají obvykle označovány integrální vztahy mezi reálnou a imaginární složkou dielektrické funkce. Ve skutečnosti lze jako Kramersovy-Kronigovy relace chápat také vztahy mezi reálnými a imaginárními složkami i jiných fyzikálních veličin, jako například komplexního indexu lomu, komplexní elektrické vodivosti nebo komplexní permeability. Při odvození těchto relací budeme postupovat dle [22](str. 30-34).

Kramersovy-Kronigovy relace vycházejí z Cauchyovy věty. Předpokládejme, že funkce $g(\omega)$, kde $\omega = \omega' + i\omega''$, je analytická na uzavřené křivce \mathcal{C} i uvnitř této křivky. Pak platí

$$\oint \frac{g(\Omega)}{\Omega - \omega} d\Omega = 0, \quad (3.21)$$

²střední doba, mezi srážkami volných elektronů s příměsemi, defekty mřížky, nebo s fonony [10]

Obrázek 3.1: Znázornění integrační křivky \mathcal{C} .

za předpokladu, že ω leží vně křivky \mathcal{C} .

Integrační křivku volíme dle obrázku 3.1, bod ω leží na reálné ose, mimo křivku \mathcal{C} . Předpokládáme, že pro případ $|\Omega| \rightarrow \infty$ se funkce $g(\Omega)$ chová jako funkce $\Omega^{-\alpha}$, kde $\alpha \geq 1$. Potom platí

$$\mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{g(\Omega')}{\Omega' - \omega} d\Omega' = i\pi g(\omega), \quad (3.22)$$

kde \mathcal{P} označuje hlavní hodnotu integrálu. Protože funkce $g(\omega)$ je obecně komplexní lze psát

$$g(\Omega) = \Re\{g(\Omega)\} + i\Im\{g(\Omega)\}. \quad (3.23)$$

Dosazením (3.22) do (3.23) dospějeme ke vztahům:

$$\Im\{g(\omega)\} = -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Re\{g(\Omega)\}}{\Omega - \omega} d\Omega, \quad (3.24)$$

$$\Re\{g(\omega)\} = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Im\{g(\Omega)\}}{\Omega - \omega} d\Omega. \quad (3.25)$$

Navíc, pokud platí $\Re\{g(-\omega)\} = \Re\{g(\omega)\}$ a $\Im\{g(-\omega)\} = -\Im\{g(\omega)\}$ přejde (3.24) a (3.25) do tvaru

$$\Im\{g(\omega)\} = -\frac{2\omega}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{\Re\{g(\Omega)\}}{\Omega^2 - \omega^2} d\Omega, \quad (3.26)$$

$$\Re\{g(\omega)\} = \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{\Im\{g(\Omega)\}}{\Omega^2 - \omega^2} d\Omega. \quad (3.27)$$

V lineárním prostředí (2.10) vyjadřuje vztah mezi \vec{D} a \vec{E} . Jak elektrická susceptibilita $\chi(\omega)$, tak dielektrická funkce $\varepsilon(\omega) = \varepsilon'(\omega) + i\varepsilon''(\omega)$ splňují matematické požadavky funkce $g(\omega)$ a lze je tak dosadit do vztahů (3.26) a (3.27). Dostáváme tak Kramersovy-Kronigovy relace pro dielektrickou funkci ve tvaru

$$\varepsilon''(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon'(\Omega) - 1}{\Omega^2 - \omega^2} d\Omega, \quad (3.28)$$

$$\varepsilon'(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{\Omega \varepsilon''(\Omega)}{\Omega^2 - \omega^2} d\Omega. \quad (3.29)$$

Obdobným způsobem lze dospět i ke Kramersovým-Kronigovým relacím pro komplexní index lomu $N = n + ik$

3.4. SELLMEIEROVA ROVNICE

$$k(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{n(\Omega) - 1}{\Omega^2 - \omega^2} d\Omega, \quad (3.30)$$

$$n(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{\Omega k(\Omega)}{\Omega^2 - \omega^2} d\Omega. \quad (3.31)$$

3.4. Sellmeierova rovnice

Sellmeierova rovnice je důsledkem provázanosti disperze a absorpce v materiálu vyjádřené vztahem (3.31) [22]. Představuje empirický vztah mezi indexem lomu materiálu a vlnovou délkou.

Obvykle bývá definována jedním ze dvou vztahů

$$n(\lambda) = A + \frac{B_1}{\lambda^2} + \frac{B_2}{\lambda^4}, \quad (3.32)$$

$$n(\lambda) = 1 + \frac{B_1 \lambda^2}{\lambda^2 - C_1} + \frac{B_2 \lambda^2}{\lambda^2 - C_2}, \quad (3.33)$$

kde A, B_1, B_2, C_1, C_2 jsou empiricky určené konstanty. Sellmeierova rovnice zavedená jedním z těchto vztahů popisuje závislost indexu lomu na vlnové délce pro materiál, který nevykazuje absorpci.

Protože index lomu N a dielektrická funkce ε spolu souvisejí vztahem (3.1), lze Sellmeierovu rovnici modifikovat tak, aby vyjadřovala závislost dielektrické funkce na vlnové délce. Pro materiál vykazující absorpci má Sellmeierova rovnice pro dielektrickou funkci tvar

$$\varepsilon(\lambda) = \varepsilon' + \varepsilon'' = 1 + \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - B^2 - i2C\lambda}, \quad (3.34)$$

kde A, B, C jsou empiricky určené konstanty [9]. V případě materiálu, který nevykazuje absorpci z (3.34) vypadne imaginární člen $i2C\lambda$.

4. Povrchové plazmonové polaritony na rozhraní vodiče a dielektrika

Povrchové plazmonové polaritony (PPP) jsou elektromagnetické vlny, šířící se na rozhraní mezi vodičem a dielektrikem. Mají evanescentní charakter, s rostoucí vzdáleností od rozhraní jsou exponenciálně tlumeny. Vznikají oscilacemi plynu vodivostních elektronů v kovu vyvolanými dopadem elektromagnetického záření. Vznik PPP bude ukázán pomocí [14].

4.1. Vlnová rovnice

Nacházíme se v prostředí bez volného náboje a proudu ($\rho_f = 0$, $\vec{J}_f = 0$). Vyjdeme z Maxwellovy rovnice (2.3) popisující Faradayův zákon, na kterou zleva aplikujeme operátor $\nabla \times$

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial(\nabla \times \vec{B})}{\partial t}. \quad (4.1)$$

V pravé straně tohoto vztahu vidíme Ampér-Maxwellův zákon vyjádřený Maxwellovou rovnicí (2.4). Protože jsme položili $\vec{J}_f = 0$, můžeme tuto rovnici dosazením rovnice (2.4) přepsat do tvaru

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E} = -\mu_0 \frac{\partial^2 \vec{D}}{\partial t^2}. \quad (4.2)$$

Využitím identity $\nabla \times \nabla \times \vec{E} \equiv \nabla(\nabla \cdot \vec{E}) - \nabla^2 \vec{E}$ a vztahu pro derivaci součinu $\nabla \cdot (\varepsilon \vec{E}) \equiv \vec{E} \cdot \nabla \varepsilon + \varepsilon \nabla \cdot \vec{E}$ můžeme vztah (4.2) vyjádřit¹ ve tvaru

$$\nabla \left(-\frac{1}{\varepsilon} \vec{E} \cdot \nabla \varepsilon \right) - \nabla^2 \vec{E} = -\mu_0 \varepsilon_0 \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}, \quad (4.3)$$

který lze za předpokladu $\nabla \varepsilon = 0$ upravit do výsledného tvaru pro elektromagnetickou vlnu

$$\nabla^2 \vec{E} - \frac{\varepsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0. \quad (4.4)$$

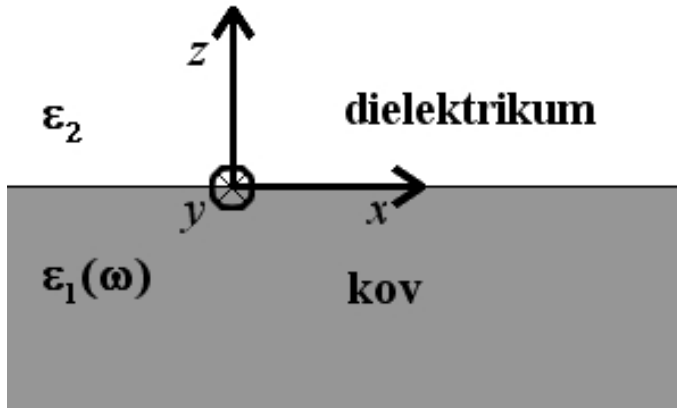
Předpokládáme harmonickou závislost elektromagnetického pole na čase, vyjádřenou vztahem $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r}) \exp(-i\omega t)$. Dosazením do vztahu (4.4) dospějeme k bezčasové rovnici pro elektromagnetickou vlnu, tzv. Helmholtzově rovnici

$$\nabla^2 \vec{E} + k_0^2 \varepsilon \vec{E} = 0, \quad (4.5)$$

kde $k_0 = \omega/c$ je vlnový vektor elektromagnetické vlny ve vakuu.

¹za předpokladu, že $\rho_f = 0$, a tedy $\nabla \cdot \vec{D} = 0$

4.2. ELEKTROMAGNETICKÁ VLNA NA ROZHRAŇÍ PROSTŘEDÍ



Obrázek 4.1: Rozhraní mezi prostředími. Optické vlastnosti prostředí jsou popsány dielektrickými funkcemi ε_1 a ε_2 .

4.2. Elektromagnetická vlna na rozhraní prostředí

Nyní se zaměříme na podmínky umožňující šíření elektromagnetické vlny podél rozhraní mezi prostředími. Na obrázku 4.1 vidíme geometrii tohoto problému. Na rozhraní ($z = 0$) mezi dvěma prostředími se ve směru osy x šíří elektromagnetická vlna popsaná vztahem $\vec{E}(x, y, z) = \vec{E}(z) \exp(i\beta x)$. Komplexní parametr β se nazývá propagační konstanta postupné vlny a odpovídá složce vlnového vektoru ve směru šíření vlny, tedy $\beta = k_x$. Dosazením do Helmholtzovy rovnice dostáváme vlnovou rovnici ve tvaru

$$\frac{\partial^2 \vec{E}(z)}{\partial z^2} + (k_0^2 \varepsilon - \beta^2) = 0. \quad (4.6)$$

Obdobná rovnice existuje také pro popis magnetického pole \vec{H} .

Aby bylo možné použít vlnovou rovnici k určení prostorové rozložení elektromagnetického pole na rozhraní, je třeba dospět k výrazům pro jednotlivé složky polí \vec{E} a \vec{H} . Toho dosáhneme pomocí Maxwellových rovnic (2.3) a (2.4). Pro harmonické pole ($\frac{\partial}{\partial t} = -i\omega$) dospějeme k následující soustavě rovnic:

$$\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} = i\omega\mu_0 H_x, \quad (4.7)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} = i\omega\mu_0 H_y, \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = i\omega\mu_0 H_z, \quad (4.9)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} = -i\omega\mu_0 E_x, \quad (4.10)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} = -i\omega\mu_0 E_y, \quad (4.11)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} = -i\omega\mu_0 E_z. \quad (4.12)$$

4. POVRCHOVÉ PLAZMONOVÉ POLARITONY NA ROZHRANÍ VODIČE A DIELEKTRIKA

Pro případ, kdy se povrchová vlna šíří ve směru osy x ($\frac{\partial}{\partial x} = i\beta$) a homogenního prostředí ve směru osy y ($\frac{\partial}{\partial y} = 0$), přejde tato soustava rovnic do jednoduššího tvaru:

$$\frac{\partial E_y}{\partial z} = -i\omega\mu_0 H_x, \quad (4.13)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} - i\beta E_z = i\omega\mu_0 H_y, \quad (4.14)$$

$$i\beta E_y = i\omega\mu_0 H_z, \quad (4.15)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial z} = i\omega\varepsilon_0 \varepsilon E_x, \quad (4.16)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - i\beta H_z = -i\omega\varepsilon_0 \varepsilon E_y, \quad (4.17)$$

$$i\beta H_y = -i\omega\varepsilon_0 \varepsilon E_z. \quad (4.18)$$

Lze ukázat, že tato soustava rovnic má dvě možná řešení, každé pro jinou polarizaci šířící se elektromagnetické vlny. Prvním řešením je transverzálně magneticky polarizovaná vlna (tzv. TM nebo p polarizace), kdy pouze složky pole E_x, E_z a H_y jsou nenulové. Druhým řešením je transverzálně elektricky polarizovaná vlna (tzv. TE nebo s polarizace), kdy pouze složky pole H_x, H_z a E_y jsou nenulové.

V případě TM polarizace se soustava rovnic (4.13)-(4.18) redukuje na vztahy

$$E_x = -i \frac{1}{\omega\varepsilon_0 \varepsilon} \frac{\partial H_y}{\partial z}, \quad (4.19)$$

$$E_z = -\frac{\beta}{\omega\varepsilon_0 \varepsilon} H_y, \quad (4.20)$$

a vlnová rovnice nabývá tvaru

$$\frac{\partial^2 H_y}{\partial z^2} + (k_0^2 \varepsilon - \beta^2) H_y = 0. \quad (4.21)$$

Analogicky pro TE polarizaci se soustava rovnic (4.13)-(4.18) redukuje na vztahy

$$H_x = i \frac{1}{\omega\mu_0} \frac{\partial E_y}{\partial z}, \quad (4.22)$$

$$H_z = \frac{\beta}{\omega\mu_0} E_y, \quad (4.23)$$

a vlnová rovnice nabývá tvaru

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2} + (k_0^2 \varepsilon - \beta^2) E_y = 0. \quad (4.24)$$

4.3. Povrchové plazmonové polaritony

Nejjednodušší geometrie umožňující existenci PPP je znázorněna na obrázku 4.1. Jedná se o rovné rozhraní mezi dielektrikem ($z > 0$), které nevykazuje absorpci ani disperzi a je popsáno reálnou, kladnou dielektrickou konstantou ε_2 , a kovem ($z < 0$), popsaným komplexní dielektrickou funkcí $\varepsilon_1(\omega)$, přičemž $\Re\{\varepsilon_1\} < 0$. Podél rozhraní ve směru osy x se šíří povrchová vlna, jejíž řešení hledáme.

V případě TM polarizace přejdou rovnice (4.19)-(4.21) do tvaru

$$H_y(z) = A_2 \exp(i\beta x) \exp(-k_2 z), \quad (4.25)$$

$$E_x(z) = iA_2 \frac{1}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_2} k_2 \exp(i\beta x) \exp(-k_2 z), \quad (4.26)$$

$$E_z(z) = -A_1 \frac{\beta}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_2} \exp(i\beta x) \exp(-k_2 z), \quad (4.27)$$

pro $z > 0$ a

$$H_y(z) = A_1 \exp(i\beta x) \exp(k_1 z), \quad (4.28)$$

$$E_x(z) = -iA_1 \frac{1}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_1} k_1 \exp(i\beta x) \exp(k_1 z), \quad (4.29)$$

$$E_z(z) = -A_1 \frac{\beta}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_1} \exp(i\beta x) \exp(k_1 z), \quad (4.30)$$

pro $z < 0$. k_1 a k_2 jsou složky vlnových vektorů kolmé k rozhraní mezi prostředími, které charakterizují útlum vlny směrem od rozhraní. Platí, že $1/k_1 = \delta_1$, kde δ_1 je hloubka průniku² PPP do kovu. Stejný vztah platí i mezi k_2 a δ_2 a určuje hloubku průniku PPP do dielektrika. Podmínka spojitosti H_y a D_z na rozhraní vyžaduje, aby $A_1 = A_2$ a navíc

$$\frac{k_2}{k_1} = -\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}. \quad (4.31)$$

Ze vztahu (4.31) a ze skutečnosti, že $k_1 > 0$ a $k_2 > 0$, plyne, že povrchová vlna existuje pouze na rozhraní mezi materiály, které mají opačná znaménka reálné části dielektrické funkce. Aby H_y bylo řešením vlnové rovnice (4.21) pro TM polarizaci, musí být

$$k_1^2 = \beta^2 - k_0^2 \varepsilon_1, \quad (4.32)$$

$$k_2^2 = \beta^2 - k_0^2 \varepsilon_2. \quad (4.33)$$

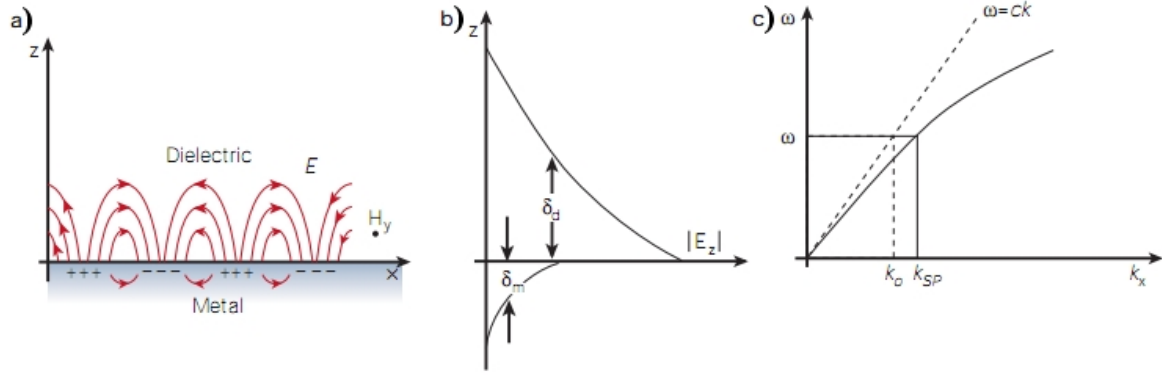
Kombinací těchto dvou vztahů se vztahem (4.31) vyjádříme propagační konstantu β ve tvaru

$$\beta = k_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}} = k_0 N_{\text{eff}}, \quad (4.34)$$

kde N_{eff} je efektivní index lomu na rozhraní mezi prostředími.

²vzdálenost od rozhraní, na které klesne amplituda E_z na $1/e$

4. POVRCHOVÉ PLAZMONOVÉ POLARITONY NA ROZHRAŇÍ VODIČE A DIELEKTRIKA



Obrázek 4.2: a) Povrchové plazmonové polaritony (PPP) na rozhraní mezi kovem a dielektrikem, b) hloubky průniku PPP do kovu δ_m a dielektrika δ_d , c) disperzní relace pro světlo (přerušovaná čára) a pro PPP (plná čára). Převzato z [1].

V případě TE polarizace přejdou rovnice (4.22)-(4.24) do tvaru

$$E_y(z) = A_2 \exp(i\beta x) \exp(-k_2 z), \quad (4.35)$$

$$H_x(z) = -iA_2 \frac{1}{\omega\mu_0} k_2 \exp(i\beta x) \exp(-k_2 z), \quad (4.36)$$

$$H_z(z) = A_2 \frac{\beta}{\omega\mu_0} \exp(i\beta x) \exp(-k_2 z), \quad (4.37)$$

$$(4.38)$$

pro $z > 0$ a

$$E_y(z) = A_1 \exp(i\beta x) \exp(k_1 z), \quad (4.39)$$

$$H_x(z) = iA_1 \frac{1}{\omega\mu_0} k_1 \exp(i\beta x) \exp(k_1 z), \quad (4.40)$$

$$H_z(z) = A_1 \frac{\beta}{\omega\mu_0} \exp(i\beta x) \exp(k_1 z), \quad (4.41)$$

$$(4.42)$$

pro $z < 0$. Spojitost složek E_y a H_x na rozhraní mezi prostředími vede k podmínce

$$A_1(k_1 + k_2) = 0. \quad (4.43)$$

Vzhledem k tomu, že k_1 a k_2 jsou vždy kladné a nenulové, je tato podmínka splněna pouze pro $A_1 = 0$, a tedy $A_1 = A_2 = 0$. Tedy pro TE polarizaci nedochází k vybuzení povrchové vlny. Povrchové plazmonové polaritony tak existují pouze pro TM polarizaci.

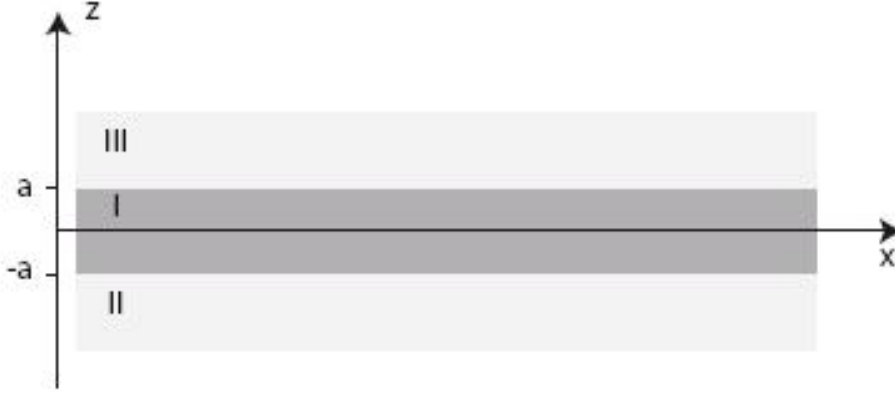
Konstanta šíření PPP β je obecně komplexní, tedy $\beta = \beta' + i\beta''$. Její reálné a imaginární složky jsou

$$\beta' = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\varepsilon'_1 \varepsilon_2}{\varepsilon'_1 + \varepsilon_2}}, \quad (4.44)$$

$$\beta'' = \frac{\omega}{c} \sqrt{\left(\frac{\varepsilon'_1 \varepsilon_2}{\varepsilon'_1 + \varepsilon_2}\right)^3 \frac{\varepsilon''_1}{2\varepsilon_1'^2}}. \quad (4.45)$$

$$(4.46)$$

4.4. PPP NA MULTIVRSTVĚ DIELEKTRIKUM-KOV-DIELEKTRIKUM



Obrázek 4.3: Geometrie systému tří vrstev. Tenká kovová vrstva I je obklopena dielektrickými vrstvami II a III.

4.4. PPP na multivrstvě dielektrikum-kov-dielektrikum

Předmět našeho zájmu, plazmonické rezonanční nanoantény, jsou kovové proužky umístěné na dielektrickém substrátu a obklopené vzduchem nebo jiným dielektrikem. Jejich struktura tak odpovídá modelu multivrstvy dielektrikum-kov-dielektrikum.

V této multivrstvě, která je na obrázku 4.3, každé z rozhraní umožňuje existenci PPP. Je-li vzdálenost mezi rozhraními srovnatelná nebo menší než hloubka průniku PPP do kovu δ_m , dochází k interakci mezi PPP na obou rozhráních a vzniku vázaných módů.

Jak bylo ukázáno v kapitole (4.3), PPP existují pouze pro elektromagnetickou vlnu s TM polarizací. Vyjdeme ze vztahů (4.19)-(4.21). Pro $z > a$ jsou složky polí vyjádřeny vztahy

$$H_y = A \exp(i\beta x) \exp(-k_3 z), \quad (4.47)$$

$$E_x = iA \frac{1}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_3} k_3 \exp(i\beta x) \exp(-k_3 z), \quad (4.48)$$

$$E_z = -A \frac{\beta}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_3} \exp(i\beta x) \exp(-k_3 z). \quad (4.49)$$

Pro $z < -a$ dospějeme ke vztahům

$$H_y = B \exp(i\beta x) \exp(k_2 z), \quad (4.50)$$

$$E_x = -iB \frac{1}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_2} k_2 \exp(i\beta x) \exp(k_2 z), \quad (4.51)$$

$$E_z = -B \frac{\beta}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_2} \exp(i\beta x) \exp(k_2 z). \quad (4.52)$$

V oblasti $-a < z < a$ dostáváme vztahy

$$H_y = C \exp(i\beta x) \exp(k_1 z) + D \exp(i\beta x) \exp(-k_1 z), \quad (4.53)$$

$$E_x = -iC \frac{1}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_1} k_1 \exp(i\beta x) \exp(k_1 z) + iD \frac{1}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_1} k_1 \exp(i\beta x) \exp(-k_1 z), \quad (4.54)$$

$$E_z = C \frac{\beta}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_1} \exp(i\beta x) \exp(k_1 z) + D \frac{\beta}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_1} \exp(i\beta x) \exp(-k_1 z). \quad (4.55)$$

4. POVRCHOVÉ PLAZMONOVÉ POLARITONY NA ROZHRAŇÍ VODIČE A DIELEKTRIKA

Požadavek spojitosti složek H_y a E_x vede k okrajovým podmínkám

$$A \exp(-k_3 a) = C \exp(k_1 a) + D \exp(-k_1 a), \quad (4.56)$$

$$\frac{A}{\varepsilon_3} k_3 \exp(-k_3 a) = -\frac{C}{\varepsilon_1} k_1 \exp(k_1 a) + \frac{D}{\varepsilon_1} k_1 \exp(-k_1 a), \quad (4.57)$$

$$(4.58)$$

pro rozhraní $z = a$ a

$$B \exp(-k_2 a) = C \exp(-k_1 a) + D \exp(k_1 a), \quad (4.59)$$

$$-\frac{B}{\varepsilon_2} k_2 \exp(-k_2 a) = -\frac{C}{\varepsilon_1} k_1 \exp(-k_1 a) + \frac{D}{\varepsilon_1} k_1 \exp(k_1 a), \quad (4.60)$$

$$(4.61)$$

pro rozhraní $z = -a$ a H_y musí navíc splňovat vlnovou rovnici (4.21) ve všech třech prostředích. Aby tomu tak bylo, musí platit

$$k_i^2 = \beta^2 - k_0^2 \varepsilon_i, \quad (4.62)$$

kde $i = 1, 2, 3$.

Řešením takovéto soustavy rovnice dospějeme k disperzní relaci ve tvaru [14]

$$\exp(-4k_1 a) = \frac{\frac{k_1}{\varepsilon_1} + \frac{k_2}{\varepsilon_2} \frac{k_1}{\varepsilon_1} + \frac{k_3}{\varepsilon_3}}{\frac{k_1}{\varepsilon_1} - \frac{k_2}{\varepsilon_2} \frac{k_1}{\varepsilon_1} - \frac{k_3}{\varepsilon_3}}, \quad (4.63)$$

která se za předpokladu, že $k_1 = k_3$ a $\varepsilon_1 = \varepsilon_3$, zjednoduší na dvojici vztahů [14]

$$\tanh(k_1 a) = -\frac{k_2 \varepsilon_1}{k_1 \varepsilon_2}, \quad (4.64)$$

$$\tanh(k_1 a) = -\frac{k_1 \varepsilon_2}{k_2 \varepsilon_1}. \quad (4.65)$$

Lze ukázat, že vztah (4.64) popisuje situaci, kdy je $E_x(z)$ vyjádřeno lichou funkcí a H_y a E_z funkcí sudou, a vztah (4.65) popisuje situaci, kdy je $E_x(z)$ vyjádřeno sudou funkcí a H_y a E_z funkcí lichou.

Mějme multivrstvu dielektrikum-kov-dielektrikum, kde kovová vrstva má tloušťku $2a$, $\varepsilon_1 = \varepsilon_1(\omega)$ je dielektrická funkce kovu a ε_2 je kladná reálná dielektrická konstanta dielektrika, které se nachází nad i pod kovovou vrstvou (viz obrázek 4.3). Aplikací disperzních vztahů (4.64) a (4.65) zjistíme, že takováto multivrstva umožňuje vznik dvou módů PPP, tzv. lichých a sudých módů [14].

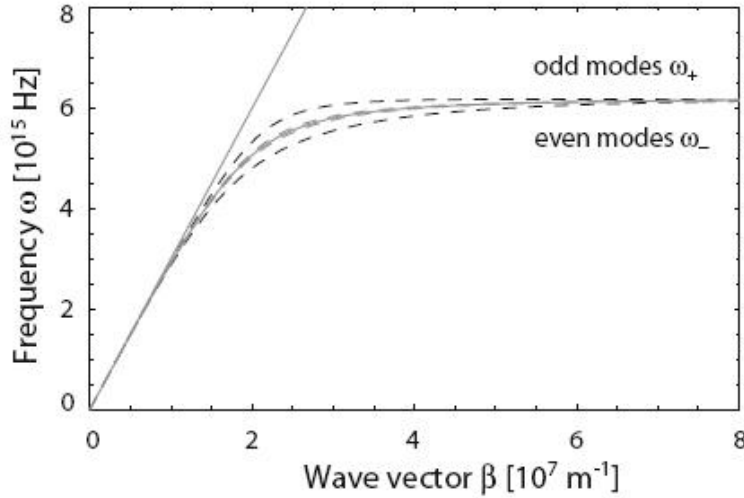
Na obrázku 4.4 vidíme disperzní relaci lichých a sudých módů PPP pro multivrstvu vzduch-stříbro-vzduch. Jak můžeme pozorovat, frekvence lichých módů PPP ω_+ jsou větší než odpovídající frekvence PPP na jednoduchém rozhraní vzduch-stříbro. Sudé módy mají naopak frekvence ω_- menší, než jsou odpovídající frekvence PPP na jednoduchém rozhraní vzduch-stříbro. Pro velké hodnoty konstanty šíření PPP β dospějeme k limitním frekvencím

$$\omega_+ = \frac{\omega_p}{\sqrt{1 + \varepsilon_2}} \sqrt{1 + \frac{2\varepsilon_2 \exp(-2\beta a)}{1 + \varepsilon_2}}, \quad (4.66)$$

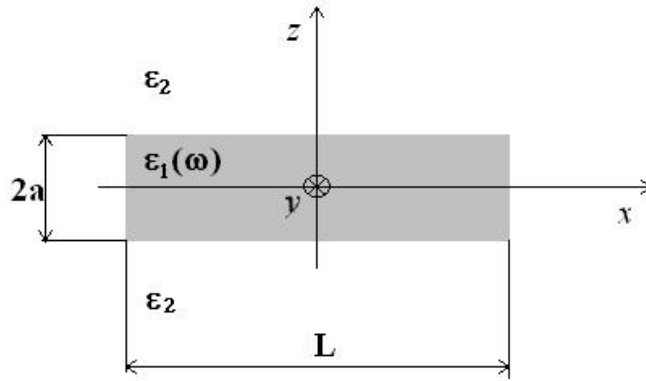
$$\omega_- = \frac{\omega_p}{\sqrt{1 + \varepsilon_2}} \sqrt{1 - \frac{2\varepsilon_2 \exp(-2\beta a)}{1 + \varepsilon_2}}. \quad (4.67)$$

Více o vlastnostech lichých a sudých módů PPP lze najít např. v [14].

4.5. LOKALIZOVANÉ POVRCHOVÉ PLAZMONY



Obrázek 4.4: Disperzní relace lichých (ω_+) a sudých (ω_-) módů PPP (přerušované čáry) pro multivrstvu vzduch-stříbro-vzduch. Tloušťka stříbrné vrstvy byla 50 nm. Šedá křivka vyjadřuje disperzní relaci PPP pro rozhraní stříbro-vzduch. Převzato z [14].

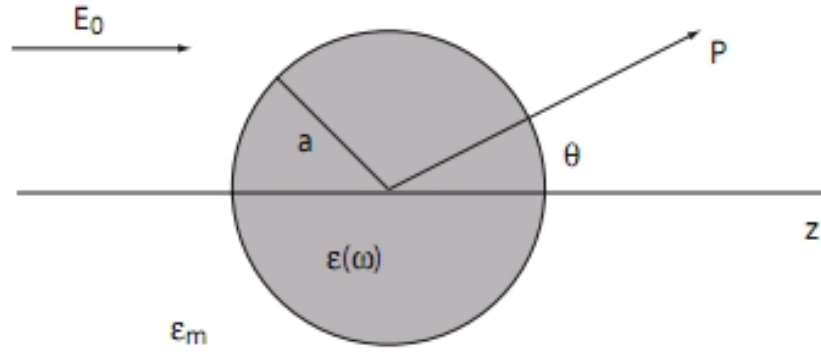


Obrázek 4.5: Multivrstva dielektrikum-kov-dielektrikum. Rozhraní se nacházejí v $z = \pm a$ a v $x = \pm L/2$. Rozměr multivrstvy ve směru osy y je nekonečný.

4.5. Lokalizované povrchové plazmony

V kapitole 4.4 jsme popsali chování povrchových plazmonových polaritonů šířících se na rozhraních multivrstvy dielektrikum-kov-dielektrikum a uvedli, že plazmonické rezonanční nanoantény jsou případem, který lze popsat pomocí multivrstvy dielektrikum-kov-dielektrikum. Rozměry multivrstvy ve směru os x a y byly nekonečné. Avšak plazmonické rezonanční antény mají rozměry ve směru os x a y konečné. Podívejme se nyní, co se stane, pokud bude rozměr kovové vrstvy ve směru osy x konečný (viz obrázek 4.5).

Povrchové plazmonové polaritony se šíří na rozhraní kov-dielektrikum ve směru osy x . Avšak x -ový rozměr rozhraní je konečný. PPP se od na konci rozhraní ($x = \pm L/2$) odráží zpět. Odraz PPP na konci rozhraní lze v ideálním případě popsat jako odraz vlny na pevném konci a pro určité vlnové délky PPP tak ve struktuře vzniká stojatá vlna. Povrchové plazmonové polaritony se tedy v x -ovém směru nešíří dále mimo rozhraní,



Obrázek 4.6: Homogenní koule o poloměru a v elektrostatickém poli. Převzato z [14].

ale jsou lokalizovány pouze v oblasti $-L/2 \leq x \leq L/2$, hovoříme o nich jako o tzv. lokalizovaných povrchových plazmonech (LPP).

Omezení x -ového rozměru kovové vrstvy způsobuje kvantování u vlnových délek lokalizovaných plazmonů, které se na rozhraní vzduch-kov mohou vyskytovat. Vznikají tak jednotlivé módy LPP, které musí splňovat podmínku vzniku stojaté vlny vyjádřenou vztahem

$$\lambda = \frac{2n_{\text{eff}}L}{j}, \quad (4.68)$$

kde $j = 1, 2, 3, \dots$

4.5.1. Kvazistatická aproximace rozptylu světla na nanočástici

Interakci částice o velikosti d s elektromagnetickým polem lze popsat užitím kvazistatické aproximace za předpokladu, že $d \ll \lambda$. Pro částice o větším rozměru, kdy se již podstatně mění fáze elektrického pole v částicích (tzv. retardace elektromagnetického pole), je nutné k popisu interakce pole a částice použít složitější Mieho teorii. Analyticky lze nicméně popsat pouze interakci pole s částicí ve tvaru koule nebo elipsoidu. Plazmonické rezonanční antény mají v našem případě tvar kvádru, proto jejich interakci se světlem nelze analyticky popsat. Proto si pouze pomocí kvazistatické aproximace demonstrováme interakci světla s kulovou nanočásticí.

Na obrázku 4.6 vidíme kulovou částici o poloměru a , jejíž optické vlastnosti popisuje dielektrická funkce $\varepsilon(\omega)$. Na částici dopadá ve směru osy z elektromagnetická vlna o amplitudě E_0 a vlnové délce λ . Kolem částice je izotropní neabsorbující prostředí charakterizované dielektrickou funkcí ε_m . Je-li $a \ll \lambda$, považujeme fázi elektrického pole v celém objemu nanočástice v daném čase za konstantní, což zjednoduší problém na problém částice v elektrostatickém poli. Tuto základní aproximaci lze pro popis rozptylu viditelného světla na nanočástici použít do průměru nanočástice kolem 100 nm [14].

Zajímá nás řešení Laplaceovy rovnice pro potenciál, $\nabla^2\Phi = 0$, ze kterého následně můžeme vyjádřit elektrické pole $\vec{E} = -\nabla\Phi$. Vzhledem k azimutální symetrii problému, dostáváme obecné řešení Laplaceovy rovnice ve tvaru [14].

$$\Phi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} [A_l r^l + B_l r^{-l+1}] P_l(\cos \theta), \quad (4.69)$$

4.5. LOKALIZOVANÉ POVRCHOVÉ PLAZMONY

kde $P_l(\cos \theta)$ jsou Legendrovy polynomy řádu l a θ je úhel mezi polohovým vektorem \vec{r} a osou z . Potenciál uvnitř Φ_{in} a vně koule Φ_{out} lze vyjádřit vztahy

$$\Phi_{\text{in}}(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l r^l P_l(\cos \theta), \quad (4.70)$$

$$\Phi_{\text{out}}(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} [B_l r^l + C_l r^{-l+1}] P_l(\cos \theta), \quad (4.71)$$

Koeficienty A_l, B_l a C_l mohou být stanoveny z okrajových podmínek v nekonečnu ($r \rightarrow \infty$) a na povrchu koule ($r = a$). Aby bylo splněno, že pro $r \rightarrow \infty$ se $\Phi_{\text{out}} \rightarrow -E_0 z = -E_0 r \cos \theta$, musí být $B_1 = -E_0$ a $B_l = 0$ pro $l \neq 1$.

Koeficienty A_l a C_l jsou stanoveny z podmínek na povrchu koule ($r = a$). Z podmínky spojitosti tečné složky elektrické indukce na rozhraní vyjádřené vztahem (2.11) plyne

$$-\frac{1}{a} \frac{\partial \Phi_{\text{in}}}{\partial \omega} \Big|_{r=a} = -\frac{1}{a} \frac{\partial \Phi_{\text{out}}}{\partial \omega} \Big|_{r=a} \quad (4.72)$$

Z podmínky spojitosti kolmé složky elektrického pole na rozhraní vyjádřené vztahem (2.13) plyne

$$-\varepsilon_0 \varepsilon \frac{\partial \Phi_{\text{in}}}{\partial r} \Big|_{r=a} = -\varepsilon_0 \varepsilon_{\text{m}} \frac{\partial \Phi_{\text{out}}}{\partial r} \Big|_{r=a} \quad (4.73)$$

Lze ukázat, že tyto okrajové podmínky vedou k hodnotám konstant $A_l = C_l = 0$ pro $l \neq 1$ a výpočtem konstant A_1 a C_1 lze dospět ke vztahům popisujícím potenciál uvnitř a vně koule

$$\Phi_{\text{in}} = -\frac{3\varepsilon_{\text{m}}}{\varepsilon + 2\varepsilon_{\text{m}}} E_0 r \cos \theta, \quad (4.74)$$

$$\Phi_{\text{out}} = -E_0 r \cos \theta + \frac{\varepsilon - \varepsilon_{\text{m}}}{\varepsilon + 2\varepsilon_{\text{m}}} E_0 a^3 \frac{\cos \theta}{r^2}. \quad (4.75)$$

Rovnice (4.75) popisuje superpozici dopadajícího elektrického pole a pole dipólu, který se nachází ve středu částice. Vztah pro Φ_{out} lze zavedením dipólového momentu \vec{p} upravit do tvaru

$$\Phi_{\text{out}} = -E_0 r \cos \theta + \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_{\text{m}}r^3}, \quad (4.76)$$

$$\vec{p} = 4\pi\varepsilon_0\varepsilon_{\text{m}}a^3 \frac{\varepsilon - \varepsilon_{\text{m}}}{\varepsilon + 2\varepsilon_{\text{m}}} \vec{E}_0. \quad (4.77)$$

Vidíme, že dopadající pole \vec{E}_0 indukuje uvnitř koule dipólový moment \vec{p} , který je úměrný dopadajícímu poli $|\vec{E}_0|$. Vyjádříme-li dipólový moment \vec{p} ve tvaru $\vec{p} = \varepsilon_0\varepsilon_{\text{m}}\alpha\vec{E}_0$ a ten srovnáme se vztahem (4.77), dospějeme ke vztahu

$$\alpha = 4\pi a^3 \frac{\varepsilon - \varepsilon_{\text{m}}}{\varepsilon + 2\varepsilon_{\text{m}}}, \quad (4.78)$$

který v elektrostatické aproximaci vyjadřuje polarizovatelnost α koule o průměru menším než je vlnová délka dopadajícího světla. Je zřejmé, že polarizovatelnost nabývá svého

4. POVRCHOVÉ PLAZMONOVÉ POLARITONY NA ROZHRANÍ VODIČE A DIELEKTRIKA

maxima právě tehdy, když $|\varepsilon + 2\varepsilon_m|$ nabývá minima. Pro vlnové délky při nichž $\Im\{\varepsilon\} = 0$ lze podmínku maxima polarizovatelnosti vyjádřit tzv. Frölichovou podmínkou ve tvaru

$$\Re\{\varepsilon(\omega)\} = -2\varepsilon_m. \quad (4.79)$$

Ze vztahů (4.74) a (4.75) lze pomocí vztahu $\vec{E} = -\nabla\Phi$ dospět k rozložení elektrického pole popsaného vztahy

$$\vec{E}_{\text{in}} = \frac{3\varepsilon_m}{\varepsilon + 2\varepsilon_m} \vec{E}_0, \quad (4.80)$$

$$\vec{E}_{\text{out}} = \vec{E}_0 + \frac{3\vec{n}(\vec{n} \cdot \vec{p}) - \vec{p}}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_m} \frac{1}{r^3}, \quad (4.81)$$

kde \vec{n} je jednotkový vektor směřující ze středu částice do bodu, v němž chceme stanovit elektrické pole \vec{E} , tedy $\vec{n} = \vec{r}/|\vec{r}|$.

Jak lze očekávat, rezonanci polarizovatelnosti α implikuje rezonanční zesílení dipólového pole vně i uvnitř částice, které je důsledkem lokalizované plazmonové rezonance. Toto zesílení dipólového elektrického pole v okolí částice při plazmonové rezonanci nachází uplatnění v optických zařízeních, senzorech a spektroskopii.

Nyní, stále ve kvazistatické aproximaci, popíšeme elektromagnetické pole vyzářené kulovou nanočásticí při lokalizované plazmonové rezonanci. Časově harmonické pole interaguje s nanočásticí, ale protože platí $a \ll \lambda$, je fáze uvnitř částice v daném okamžiku konstantní. Dopadající rovinná elektrická vlna $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 \exp(-i\omega t)$ indukuje v nanočástici dipólový moment $\vec{p}(t) = \varepsilon_0\varepsilon_m\alpha\vec{E}_0 \exp(i\omega t)$. Dopadající vlna je na kulové nanočástici rozptýlena. Kulová nanočástice představuje bodový dipól.

Časově harmonické elektromagnetické pole³ elektrického dipólu můžeme pro všechny vzdálenosti od dipólu popsat vztahy [14]

$$\vec{H} = \frac{ck^2}{4\pi} (\vec{n} \times \vec{p}) \frac{\exp(ikr)}{r} \left(1 - \frac{1}{ikr}\right), \quad (4.82)$$

$$\vec{E} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_m} \left\{ k^2 (\vec{n} \times \vec{p}) \times \vec{n} \frac{\exp(ikr)}{r} + [3\vec{n}(\vec{n} \cdot \vec{p}) - \vec{p}] \left(\frac{1}{r^3} - \frac{ik}{r^2} \right) \exp(ikr) \right\}, \quad (4.83)$$

kde $k = 2\pi/\lambda$. V blízkosti nanočástice, kde $kr \ll 1$, přejdou vztahy (4.82) a (4.83) do tvaru

$$\vec{E} = \frac{3\vec{n}(\vec{n} \cdot \vec{p}) - \vec{p}}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_m} \frac{1}{r^3}, \quad (4.84)$$

$$\vec{H} = \frac{i\omega}{4\pi} (\vec{n} \times \vec{p}) \frac{1}{r^2}. \quad (4.85)$$

Ve velké vzdálenosti od nanočástice, kde $kr \gg 1$ přejdou vztahy (4.82) a (4.83) do tvaru pro kulovou vlnu

$$\vec{H} = \frac{ck^2}{4\pi} (\vec{n} \times \vec{p}) \frac{\exp(ikr)}{r}, \quad (4.86)$$

$$\vec{E} = \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0\varepsilon_m}} \vec{H} \times \vec{n}. \quad (4.87)$$

³ $\vec{E}(t) = \vec{E} \exp(-i\omega t)$, $\vec{H}(t) = \vec{H} \exp(-i\omega t)$

4.5. LOKALIZOVANÉ POVRCHOVÉ PLAZMONY

Dalším důsledkem rezonančního zesílení polarizovatelnosti nanočástice α je zesílení schopnosti nanočástice rozptylovat či absorbovat dopadající světlo. Tato schopnost je vyjádřena prostřednictvím účinných průřezů nanočástice pro rozptyl C_{sca} , absorpci C_{abs} a extinkci C_{ext} . Účinné průřezy pro kulovou částici jsou popsány vztahy [14]:

$$C_{\text{sca}} = \frac{k^4}{6\pi} |\alpha|^2 = \frac{8\pi}{3} k^4 a^6 \left| \frac{\varepsilon - \varepsilon_{\text{m}}}{\varepsilon + 2\varepsilon_{\text{m}}} \right|^2, \quad (4.88)$$

$$C_{\text{abs}} = k \Im\{\alpha\} = 4\pi k a^3 \Im\left\{ \frac{\varepsilon - \varepsilon_{\text{m}}}{\varepsilon + 2\varepsilon_{\text{m}}} \right\}, \quad (4.89)$$

$$C_{\text{ext}} = C_{\text{abs}} + C_{\text{sca}} = 9 \frac{\omega}{c} \varepsilon_{\text{m}}^{3/2} V \frac{\Im\{\varepsilon\}}{[\Re\{\varepsilon\} + 2\varepsilon_{\text{m}}]^2 + \Im\{\varepsilon\}^2}. \quad (4.90)$$

5. Simulační metoda FDTD

K simulacím buzení lokalizovaných povrchových plazmonů jsme použili komerční program Lumerical FDTD Solution 6.5.0. Tento program umožňuje provádět simulace 2D a 3D elektromagnetických problémů. K výpočtům prostorového rozložení a časového vývoje elektromagnetického pole používá metody konečných diferencí v časové oblasti (Finite Difference Time Domain, FDTD).

5.1. O metodě FDTD

Numerická metoda FDTD se v poslední době stala nejrozšířenější metodou používanou k řešení Maxwellových rovnic ve strukturách se složitou geometrií [7], [11]. Metoda FDTD je založena na diskretizaci Maxwellových rovnic (2.3), (2.4) a (2.10) v prostoru i čase.

Na jednoduchém případě budeme demonstrovat, jak vlastně funguje tato metoda [23]. Mějme lineárně polarizovanou elektromagnetickou vlnu šířící se ve směru osy z . Vektor elektrické intenzity \vec{E} kmitá ve směru osy x a vektor magnetické intenzity \vec{H} ve směru osy y . Nejprve provedeme diskretizaci prostoru a času. Zavedeme indexy m, n . Prostor a čas pomocí nich rozdělíme na díly tak, že m -tý prostorový krok a n -tý časový krok budou s polohou z a časem t souviset vztahy

$$z = m\Delta z, \quad (5.1)$$

$$t = n\Delta t. \quad (5.2)$$

K diskretizaci elektromagnetického pole v prostoru i čase užijeme metody centrálních diferencí. Parciální derivace elektrického pole podle polohy a podle času lze vyjádřit jako

$$\frac{\partial E}{\partial z} \rightarrow \frac{\Delta E}{\Delta z} = \frac{E(m + \frac{1}{2}) - E(m - \frac{1}{2})}{\Delta z}, \quad (5.3)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} \rightarrow \frac{\Delta E}{\Delta t} = \frac{E(n + \frac{1}{2}) - E(n - \frac{1}{2})}{\Delta t}. \quad (5.4)$$

Obdobně pak postupujeme pro magnetické pole.

Dosadíme-li vztahy (5.3) a (5.4) do Maxwellových rovnic (2.3) a (2.4), dospějeme k Maxwellovým rovnicím ve tvaru

$$\frac{E_x^{n+1}(m) - E_x^{n-1}(m)}{\Delta t} = -\frac{H_y^n(m + \frac{1}{2}) - H_y^n(m - \frac{1}{2})}{\varepsilon_0 \Delta z}, \quad (5.5)$$

$$\frac{H_y^{n+1}(m + \frac{1}{2}) - H_y^{n-\frac{1}{2}}(m + \frac{1}{2})}{\Delta t} = -\frac{E_x^{n+\frac{1}{2}}(m + 1) - E_x^{n+\frac{1}{2}}(m)}{\mu_0 \Delta z}. \quad (5.6)$$

Rovnice (5.5) a (5.6) se pak střídavě počítají v prostorových a časových krocích. Následkem střídání prostorových a časových kroků je to, že časový vývoj jednoho pole¹ v následujícím kroku je počítán z prostorového vývoje druhého pole v předchozím kroku.

¹elektrického nebo magnetického

5.2. CW NORMOVÁNÍ

V určitém místě v prostoru lze hodnotu pole v každém časovém kroku určit z hodnoty polí v předchozím kroku. Toto bude zřejmé pokud vyjádříme pole pomocí rovnic (5.5) a (5.6) v posledním časovém kroku. Potom tyto rovnice přejdou do tvaru

$$E_x^{n+\frac{1}{2}}(m) = E_x^{n-\frac{1}{2}}(m) - \frac{\Delta t}{\varepsilon_0 \Delta z} \left[H_y^n \left(m + \frac{1}{2} \right) - H_y^n \left(m - \frac{1}{2} \right) \right], \quad (5.7)$$

$$H_y^{n+1} \left(m + \frac{1}{2} \right) = H_y^n \left(m + \frac{1}{2} \right) - \frac{\Delta t}{\mu_0 \Delta z} \left[E_x^{n+\frac{1}{2}}(m+1) - E_x^{n+\frac{1}{2}}(m) \right]. \quad (5.8)$$

Nastavení velikosti kroků je velice důležité. Nastavení prostorových kroků, tj. velikosti buněk², do kterých bude oblast simulace rozdělena, se obvykle řídí vlnovou délkou použitého elektromagnetického záření. Obecně platí, že každý rozměr buňky by měl být menší než desetina nejmenší vlnové délky použité v simulaci. Samozřejmě, pokud simulujeme struktury, které jsou menší než vlnová délka použitého záření, pak je nutné velikost simulačních buněk upravit těmto strukturám. Pokud by totiž byly rozměry simulační buňky větší než rozměry takovýchto struktur, pak by hodnoty pole v těchto buňkách byly značně zkreslené. Rovněž k simulaci zakřivených povrchů je nutné simulační síť složenou z kvádrů³ dostatečně zjemnit.

Nastavení časového kroku se řídí tzv. Courantovou podmínkou. Nastavení prostorového a časového kroku lze vyjádřit takto

$$\Delta z \leq \frac{\lambda_{\min}}{10}, \quad (5.9)$$

$$\Delta t \leq \frac{\Delta z}{2c_0}, \quad (5.10)$$

kde λ_{\min} je nejmenší vlnová délka vyskytující se v simulaci a c_0 je rychlost světla ve vakuu.

Program nastaví časový i prostorový krok na podmínkami určené maximum, uživatel ovšem může velikosti kroků zmenšit. Zatímco zjemnění prostorového kroku přinese většinou vždy přesnější výsledky, zjemnění časového kroku tento efekt v naprosté většině případů nemá.

5.2. CW normování

Program Lumerical dokáže v simulacích pracovat pouze s pulzními zdroji elektromagnetického záření. Na první pohled se to může jevit jako značné omezení, avšak tento program je vybaven matematickým aparátem pro přepočítání světelného pulzu na spojitou vlnu. Tento aparát nese označení CW normování (Continuous Wave Normalization).

Normovaná elektrická intenzita $\vec{E}_{\text{norm}}(\omega)$ je dle [7] definována jako

$$\vec{E}_{\text{norm}}(\omega) = \frac{1}{\text{norm}(\omega)} \int \exp(i\omega t) \vec{E}(t) dt, \quad (5.11)$$

$$\text{norm}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\text{zdroje}} \int \exp(i\omega t) S(t) dt, \quad (5.12)$$

²kvádrů o rozměrech Δx , Δy a Δz , anglicky tzv. Yee Cells

³simulační síť složená z kvádrů zaručuje splnění podmínek vyjádřených Maxwellovými rovnicemi (2.1) a (2.2) a urychluje tak výpočet, neboť výpočty těchto dvou rovnic se neprovádí

kde $S(t)$ popisuje, jak se s časem mění signál zdroje⁴ a N je počet zdrojů elektromagnetického záření uvnitř oblasti simulace.

Tedy bez použití CW normování lze elektrické pole zdroje vyjádřit jako součin amplitudy \vec{E}_0 a $S(t)$

$$\vec{E}(x, y, z, t) = \vec{E}_0(x, y, z)S(t) \quad (5.13)$$

S použitím CW normování se elektrické pole změnilo na tvar:

$$\vec{E}(x, y, z, \omega) = \vec{E}_0(x, y, z) \quad (5.14)$$

Po aplikaci CW normování na zdroj pole dojde k eliminaci veškerých frekvenčně závislých jevů, které byly vyvolány konečnou délkou pulsu. Nemonochromatický světelný puls je tak při dalších výpočtech nahrazen souborem spojitých vln. Soubor obsahuje všechny vlnové délky jako původní puls, ale amplituda je pro všechny vlnové délky stejná.

Tedy hlavní výhodou CW normování je možnost získat v jediné simulaci spektrální odezvu systému na všech frekvencích, které nás zajímají.

⁴S(t) tak vlastně popisuje jak vypadá obálka pulsu

6. Simulace a výsledky

Naším cílem bylo provést simulace optických rezonančních vlastností kovových nanostruktur v oblasti viditelného a případně blízkého infračerveného spektra. Tato oblast spektra nás značně omezuje jak ve volbě materiálu pro nanostruktury, tak i ve volbě substrátu.

6.1. Volba materiálu

V případě materiálu pro nanostruktury se vyžaduje, aby ve zkoumané oblasti spektra bylo dopadající elektromagnetické záření při interakci s nanostrukturou co nejméně tlumeno, tedy aby v této oblasti spektra imaginární část dielektrické funkce materiálu ε'' nabývala svého minima. Jako substrát je pro zkoumání rezonančních vlastností nanostruktur vhodný takový materiál, který v dané oblasti elektromagnetického spektra nevykazuje disperzi^{1,2}.

Jen málo materiálů vyhovuje v oblasti viditelného spektra svými optickými vlastnostmi těmto požadavkům. Z kovů jsou takovými materiály zlato a stříbro [14](kapitola 5 – *Localized Surface Plasmons*). Dle [24](kapitola 4 – *Metals*) imaginární část dielektrické funkce zlata $\varepsilon''_{\text{Au}}$ nabývá minima přibližně pro vlnovou délku³ světla $\lambda = 690$ nm. V případě stříbra nabývá imaginární část dielektrické funkce $\varepsilon''_{\text{Ag}}$ minima přibližně pro vlnovou délku světla $\lambda = 330$ nm.

Jako vhodný substrát pro plazmonické nanostruktury pro viditelnou oblast spektra se jeví křemenné sklo (SiO_2). Toto sklo totiž dle [21] ve spektrální oblasti od 200 nm do 3500 nm nevykazuje absorpci⁴ ($k = 0$) a navíc ve zkoumané oblasti viditelného a blízkého infračerveného spektra vykazuje malou jen malou disperzi, relativní změna reálné části indexu lomu n je přibližně jen 2 %.

6.2. Nastavení simulací

Všechny námi provedené simulace měly několik společných znaků. Byly simulovány zlaté antény na skleněném substrátu. Dielektrické funkce zlata a skla byly brány z interní databáze programu Lumerical. Zdroje pro tuto interní materiálovou databázi jsou uvedeny v [27].

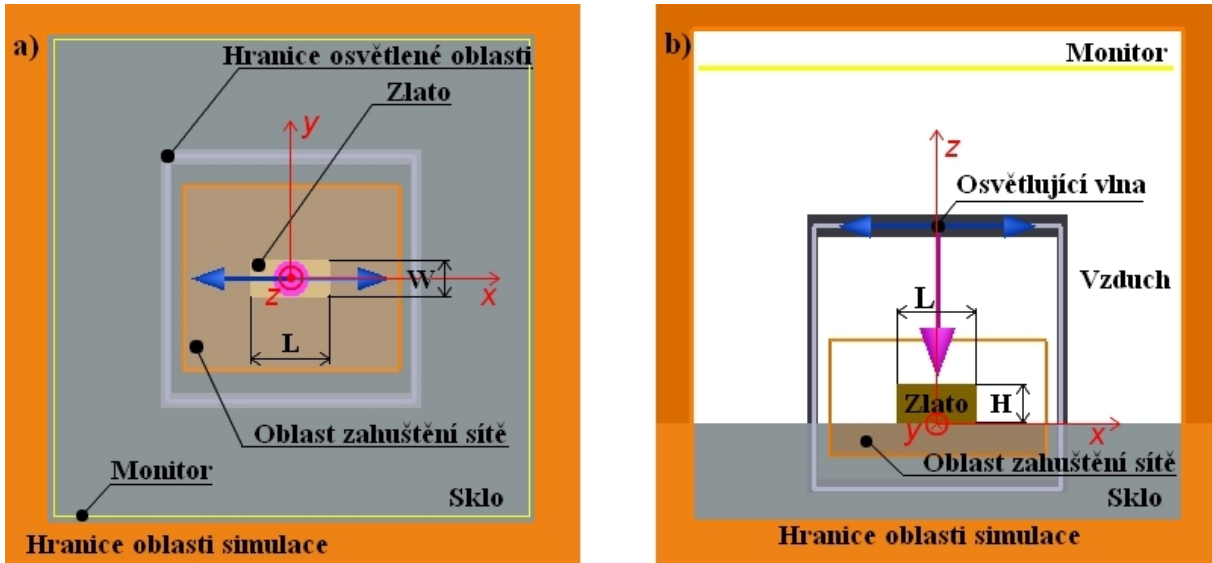
Jako zdroj světla jsme použili tzv. *total-field scattered-field source* (TFSF). Volba tohoto druhu zdroje umožňuje prostorově vymezit oblast, která bude osvětlována rovinnou vlnou. Osvětlovaná oblast je vyznačena na obrázku 6.1. Mimo takto vymezenou oblast se již osvětlující rovinná vlna nešíří. Pokud nějaké světlo opouští tuto oblast, jedná se o světlo rozptýlené anténou nebo odražené od substrátu.

¹respektive jehož disperze je zanedbatelná

²Dle Kramersových-Kronigových relací (kapitola 3.3) malá disperze odpovídá i malé absorpci

³v [24] vystupuje energie fotonu E , a reálná a imaginární část indexu lomu n a k . Imaginární část dielektrické funkce získáme z n a k pomocí (3.3), vlnovou délku λ získáme z energie E pomocí $\lambda = hc/E$, kde h je Planckova konstanta a c je rychlost světla

⁴respektive absorpce je nezměřitelná



Obrázek 6.1: Návrh simulace zlaté nanoantény na skleněném substrátu. Rozměr antény je $L \times W \times H$. Modré šipky znázorňují kmitosměr vektoru elektrické intenzity, fialová šipka označuje směr vlnového vektoru. a) pohled shora, b) pohled z boku.

Světelný zdroj TFSF jsme umístili přibližně 300 nm nad rozhraní antény a substrátu. Antény byly osvětlovány polarizovaným bílým pulzem⁵ o vlnové délce 400-800 nm. Na tento zdroj světla bylo aplikováno tzv. CW normování (kapitola 5.2). V důsledku je tak anténa osvětlována souborem mnoha monochromatických vln o stejné amplitudě a o vlnových délkách od 400 nm do 800 nm.

Výpočty probíhají v celé oblasti vymezené jejími hranicemi, nicméně data o elektromagnetickém poli jsou ukládána pouze v oblastech, kam umístíme tzv. *monitory*. *Monitor* může být bod, přímka, plocha i objem. *Monitor* zaznamenává a následně ukládá data o elektromagnetickém poli ve zvoleném rozsahu frekvencí. Data uložená *monitorem* lze následně zpracovat přímo v programu Lumerical nebo exportovat do textového souboru pro další zpracování. Na obrázku (6.1) jsme pro názornost vyznačili pouze jeden *monitor*.

6.3. Volba okrajových podmínek

Volba okrajových podmínek (OP) má výrazný vliv na výsledek simulace a často může i změnit celou podstatu simulovaného jevu. Program Lumerical umožňuje volit mezi několika druhy OP. OP lze pro každou stěnu simulační oblasti volit nezávisle⁶.

Program Lumerical umožňuje nastavit následující OP [7], [26]:

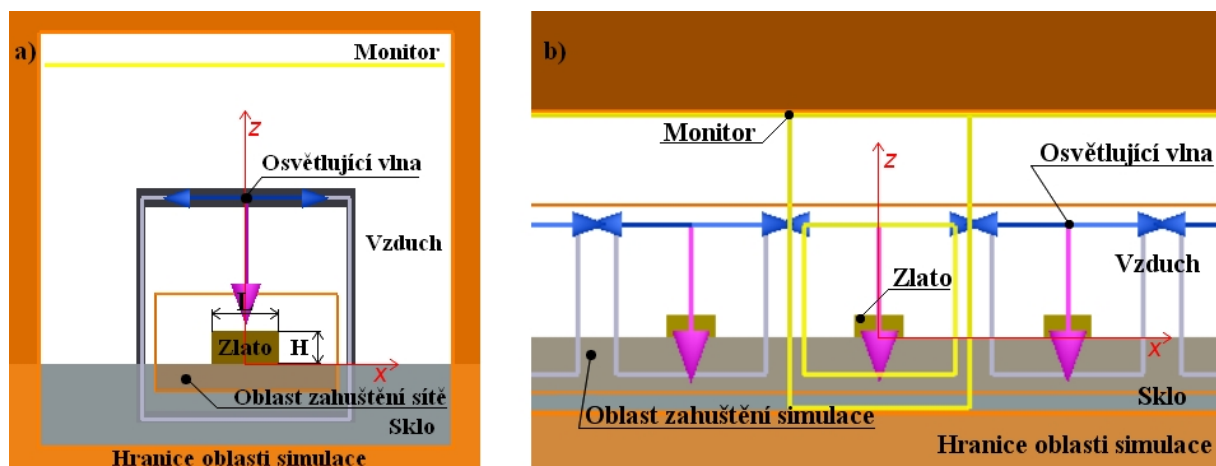
PML – Takzvané *Perfectly Matched Layers*. Jedná se o absorpční OP, které umožňují šíření elektromagnetické vlny vně oblasti simulace. Vlna je na okraji simulační oblasti utlumena a neodráží se zpět do oblasti simulace.

periodické – Tyto OP se používají pro simulaci periodických struktur. Simulace ovšem probíhá pouze v jedné buňce periodické struktury.

⁵vlnovým klubkem, které je složeno z vln o různé vlnové délce a různé amplitudě

⁶výjimku samozřejmě tvoří periodické OP, kdy po volbě těchto OP na jedné stěně simulační oblasti jsou periodické OP automaticky nastaveny i na protější stěně

6.3. VOLBA OKRAJOVÝCH PODMÍNEK



Obrázek 6.2: Návrh 2D simulace a) zlaté antény délky L a výšky H na skleněném substrátu, b) pole více zlatých antén, které slouží k napodobení periodické struktury. Modré šipky znázorňují kmitosměr vektoru elektrické intenzity, fialová šipka směr vlnového vektoru osvětlující vlny.

Blochovy – Blochovy OP jsou obdobou periodických OP. Používají se v případě, kdy zdroje osvětlení v jednotlivých buňkách periodické struktury nejsou ve fázi.

symetrické – Tyto OP lze použít, pokud simulovaná struktura i zdroj elektromagnetického záření mají alespoň jednu rovinu symetrie. Rovina symetrie zrcadlí elektrické pole symetricky a magnetické pole antisymetricky. Použití těchto podmínek snižuje časové a paměťové nároky simulace, neboť simulace probíhá pouze v jedné části⁷ simulační oblasti a nakonec je elektromagnetické pole zrcadleno dle OP.

antisymetrické – Jedná se o obdobu symetrických OP. Rovina symetrie zrcadlí elektrické pole antisymetricky a magnetické pole symetricky.

kovové – Tyto OP se chovají jako dokonalý kov a odráží veškeré dopadající elektromagnetické záření zpět do oblasti simulace.

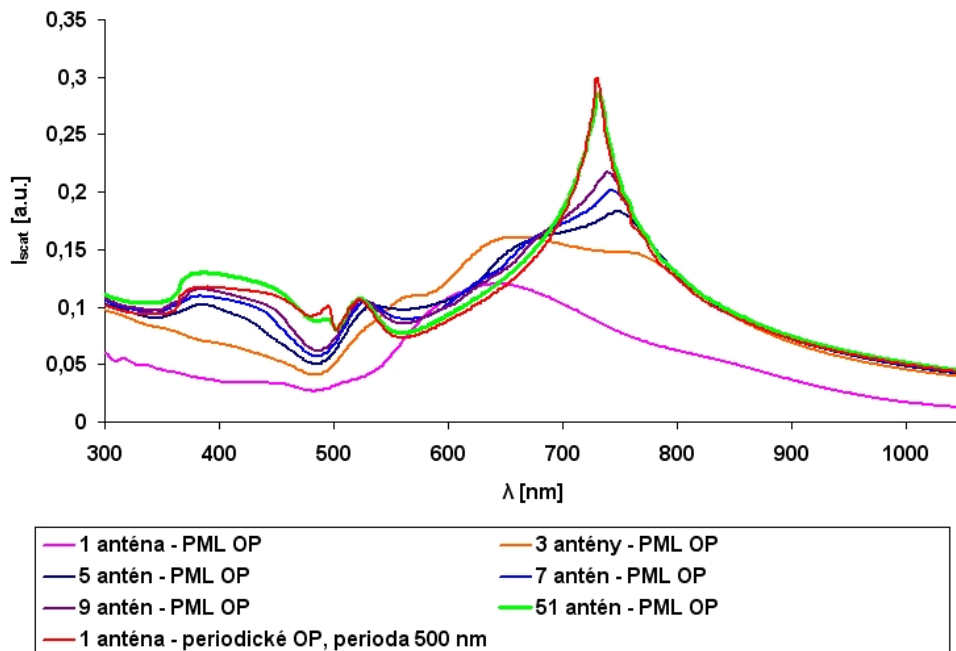
Návrh simulací

V našem případě připadají do úvahy absorpční podmínky PML nebo periodické OP. V případě PML OP bychom simulovali interakci záření s jedinou anténou. V případě periodických OP bychom simulovali interakci záření s nekonečným periodickým polem antén. Abychom zjistili, které OP je lepší použít pro další simulace, provedli jsme 2D⁸ simulace jedné zlaté antény⁹ délky $L = 130$ nm a výšky $H = 60$ nm na skleněném substrátu. Schéma simulace je na obrázku 6.2 a). Rozměr oblasti simulace je (500×700) nm². Hustota simulační sítě byla programem zvolena automaticky, v okolí antény jsme ovšem simulační síť zahustili tak, že velikost jedné simulační buňky byla $(0,5 \times 0,5)$ nm².

⁷V případě problému s jednou rovinou symetrie je touto částí polovina simulační oblasti, v případě problému se třemi rovinami symetrie je to osmina simulační oblasti

⁸z důvodu menší časové náročnosti

⁹při 2D simulaci se třetí rozměr chápe jako nekonečný, tedy v těchto 2D simulacích se jedná o anténu nekonečné šířky, tedy spíše o nanodráť.



Obrázek 6.3: Vlnová spektra rozptýleného světla pro různý počet antén při použití okrajových podmínek PML a pro jednu anténu při použití periodických okrajových podmínek. Jedná se o výsledek 2D simulací pro anténu délky $L = 130$ nm a výšky $H = 60$ nm. V případě 3, 5, 7, a 9 antén byla rozteč mezi středy sousedních antén 500 nm. Intenzita rozptýleného světla I_{scat} je normována k intenzitě dopadajícího světla.

Při jedné simulaci jsme použili OP PML jak ve směru osy x tak osy z . Při druhé simulaci jsme použili periodické OP s periodicitou 500 nm ve směru osy x a OP PML ve směru osy z . Sledovali jsme relativní intenzitu¹⁰ rozptýleného světla I_{scat} prošlého lineárním monitorem o rozměru 500 nm umístěného 500 nm nad skleněným substrátem. Jak je patrné z obrázku 6.3, spektra rozptýleného světla I_{scat} pro jednu anténu se pro OP PML a periodické OP výrazně odlišují. Proto jsme provedli ještě simulace pro 3, 5, 7, 9 a 51 stejných antén s roztečí antén 500 nm. Jak ve směru osy x , tak ve směru osy z jsme použili PML OP. Schéma takovýchto simulací je na obrázku 6.2 b). V těchto simulacích jsme sledovali, zda se spektrum rozptýleného světla s rostoucím počtem stejných antén začne blížit spektru rozptýleného světla pro jednu anténu při použití periodických OP.

Vyhodnocení simulací

Jak je patrné z obrázku 6.3 spektra rozptýleného světla I_{scat} pro jednu anténu se pro OP PML a periodické OP výrazně odlišují jak v intenzitě rozptýleného světla, tak ve vlnové délce, pro kterou dosahuje I_{scat} svého maxima. V případě jedné antény a okrajových podmínek PML je maximální relativní intenzita rozptýleného světla $I_{\text{scat}} \doteq 0,12$ a to pro vlnovou délku $\lambda = 644$ nm. V případě stejné antény s periodickými OP je $I_{\text{scat}} \doteq 0,30$ pro vlnovou délku $\lambda = 731$ nm.

Vzhledem k tomuto nesouladu ve výsledcích byly provedeny další simulace pro 3, 5, 7, 9 a 51 stejných antén pro OP PML. Jak je patrné z obrázku 6.3, již pro 3 antény se ve spektru rozptýleného světla objevuje pík pro vlnovou délku $\lambda \doteq 750$ nm. Relativní

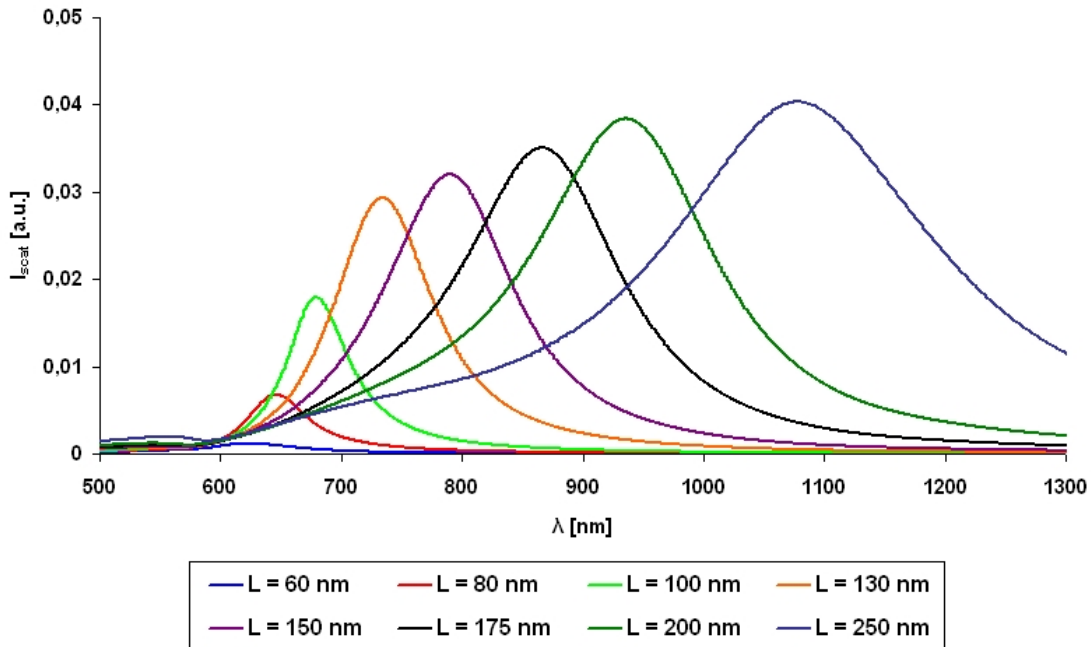
¹⁰intenzitu normovanou k intenzitě dopadajícího světla

6.3. VOLBA OKRAJOVÝCH PODMÍNEK

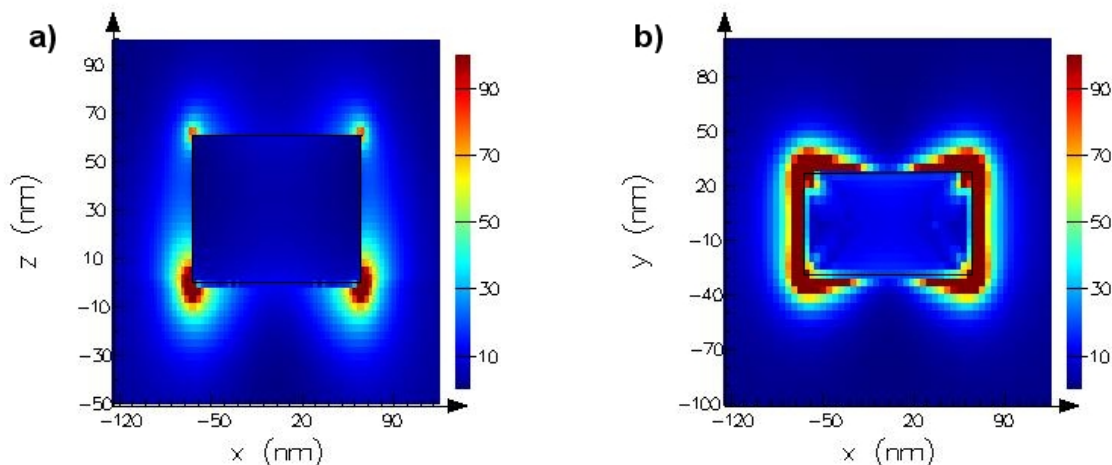
intenzita rozptýleného světla I_{scat} pro tuto vlnovou délku je přibližně 0,14. S rostoucím počtem antén tento pík roste a mírně se posouvá k menším vlnovým délkám. Jak je dále patrné, pro 51 antén ve spektru rozptýleného světla není výraznějšího rozdílu mezi rozptylovým spektrem konečné periodické struktury tvořené 51 anténami a nekonečné periodické struktury představované jedinou anténou a periodickými okrajovými podmínkami.

Pokud tedy chceme stanovit rezonanční vlnovou délku jedné nanoantény o délce $L = 130 \text{ nm}$ a výšce $H = 60 \text{ nm}$, pak je jí vlnová délka $\lambda_r = 644 \text{ nm}$. Podstatně výraznější a užší píky v oblasti kolem 730-750 nm, které se objevují pro pole více stejných antén a pro nekonečnou periodickou strukturu, jsou zjevně vyvolány vzájemnou interakcí mezi nanoanténami. Tyto píky tak nepopisují rezonanční vlastnosti jedné zlaté nanoantény, nýbrž rezonanční vlastnosti celého pole takovýchto nanoantén. Posun rezonanční frekvence vlivem vzájemné interakce antén směrem k větším vlnovým délkám (tzv. červený posuv) je v souladu s literaturou [14] (str. 80-85), [18]. Větší relativní intenzita rozptylových píků pro periodické struktury je způsobena vícenásobným rozptylem dopadajícího světla. Světlo, které je na první anténě rozptýleno mimo monitor, může být rozptýleno směrem k sousední anténě a od ní pak do monitoru.

Vzhledem k tomu, že nás hlavně zajímají rezonanční vlastnosti jednotlivých zlatých nanoantén, nikoliv vliv periodicity struktury na tyto rezonanční vlastnosti, budeme ve všech následujících simulacích pracovat pouze s jedinou anténou. Nadále tedy budeme používat pouze absorpční okrajové podmínky PML.



Obrázek 6.4: Vlnová spektra rozptýleného světla pro různé délky antén L . Šířka W i výška antény H je 60 nm. Intenzita rozptýleného světla I_{scat} , prošlého detektorem o rozměrech $(600 \times 600) \text{ nm}^2$ umístěným 600 nm nad rozhraním antény a substrátu, je normována k intenzitě dopadajícího světla.



Obrázek 6.5: Relativní intenzita elektrického pole I_{enh} v okolí antény o rozměrech $(130 \times 60 \times 60) \text{ nm}^3$ pro rezonanční vlnovou délku $\lambda_r = 734 \text{ nm}$. a) pohled z boku (rovina xz , $y = 0$), b) pohled shora (rovina xy , $z = 0$).

6.4. Rezonanční vlastnosti zlatých antén na skleněném substrátu

Poté, co jsme si ujasnili, jaké OP v našich simulacích použít, zaměřili jsme se na studium rezonančních vlastností zlatých nanoantén o rozměrech $L \times W \times H$ na skleněném substrátu. Všechny následující simulace byly již prováděny ve 3D. Provedli jsme tři série simulací, v nichž jsme se zaměřili na to, jak se změní rezonanční vlnová délka λ_r a intenzita elektrického pole I_{enh} v okolí antény vlivem změny jednoho z rozměrů antény. V každé sérii jsme měnili jeden rozměr antény a zbylé dva rozměry nechali konstantní.

6.4.1. Vliv délky antény L

Návrh simulací

V první sérii simulací jsme ponechali konstantní šířku antény $W = 60 \text{ nm}$ a výšku antény $H = 60 \text{ nm}$. Délku antény L jsme v jednotlivých simulacích zvolili 60, 80, 100, 130, 150, 175, 200 a 250 nm. Rozměr simulační oblasti byl $(800 \times 800 \times 700) \text{ nm}^3$. Hustota simulační sítě byla nastavena programem automaticky, v okolí antény jsme ovšem simulační síť zahustili tak, že rozměr jedné buňky sítě byl $(1,5 \times 1,5 \times 1,5) \text{ nm}^3$. Na okraji oblasti simulace jsme použili okrajové podmínky PML. Monitor pro detekci světla rozptýleného anténou jsme umístili 600 nm nad substrát. Rozměry monitoru byly $600 \times 600 \text{ nm}$. Monitor pro detekci intenzity elektrického pole v okolí antény jsme umístili na rozhraní mezi substrátem a anténou. Schéma takovýchto simulací je na obrázku 6.1.

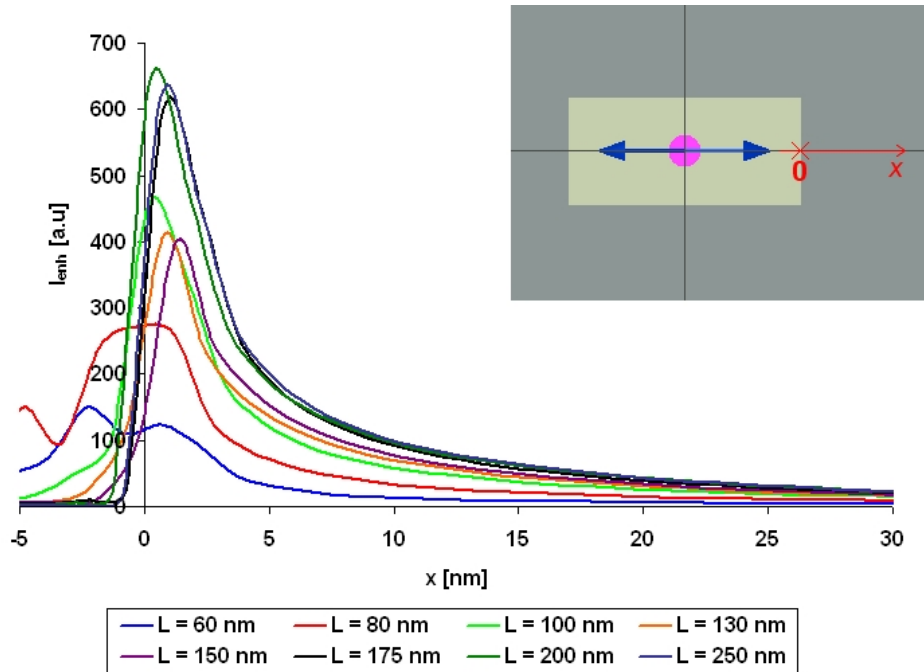
Vyhodnocení simulací

Vlnová spektra světla rozptýleného nanoanténou pro jednotlivé délky antény L jsou na obrázku 6.4. Zesílení elektrického pole v okolí antény je patrné z obrázku 6.5. Rezonanční vlnové délky jednotlivých antén o délce L jsou uvedené v tabulce 6.1 a vyneseny do grafu na obrázku 6.7.

6.4. REZONANČNÍ VLASTNOSTI ZLATÝCH ANTÉN NA SKLENĚNÉM SUBSTRÁTU

Tabulka 6.1: Rezonanční vlnové délky λ_r a normovaná intenzita elektrického pole I_{enh} pro antény o délce L , šířce $W = 60$ nm a výšce $H = 60$ nm. Efektivní index lomu N_{eff} je uveden pro rezonanční vlnové délky λ_r . I_{enh} je odečítána u čela antény na rozhraní antény a substrátu.

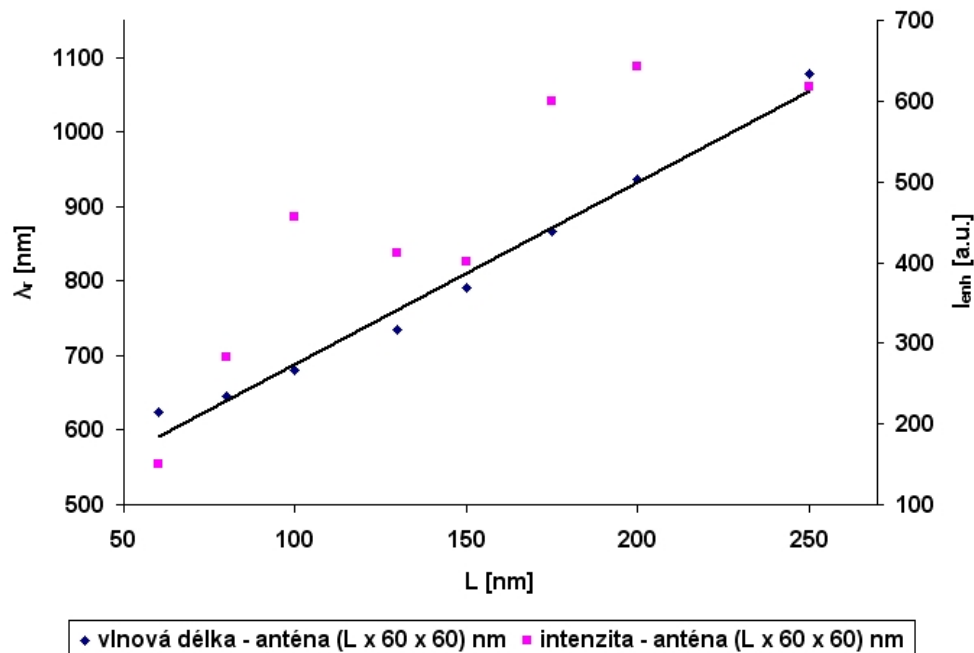
L [nm]	λ_r [nm]	I_{enh} [a.u.]	N_{eff}
60	624	149	$1,65 + 1,18 \cdot 10^{-2} i$
80	646	283	$1,62 + 6,84 \cdot 10^{-3} i$
100	680	456	$1,59 + 4,06 \cdot 10^{-3} i$
130	734	411	$1,56 + 3,20 \cdot 10^{-3} i$
150	790	402	$1,54 + 3,32 \cdot 10^{-3} i$
175	867	600	$1,52 + 3,61 \cdot 10^{-3} i$
200	936	642	$1,51 + 3,75 \cdot 10^{-3} i$
250	1078	618	$1,49 + 3,77 \cdot 10^{-3} i$



Obrázek 6.6: Normovaná intenzita elektrického pole I_{enh} v blízkosti antény délky L pro rezonanční vlnové délky λ_r . Šířka W i výška antény H je 60 nm. I_{enh} je odečítáno na rozhraní mezi anténou a substrátem ($z = 0$). x označuje vzdálenost od antény. I_{enh} je normována k intenzitě dopadajícího světla. Červený křížek ve vloženém obrázku označuje bod, v němž klademe $x = 0$ a osa x pak body, v nichž odečítáme I_{enh} .

Jak je patrné z obrázku 6.7, rezonanční vlnová délka λ_r se mění lineárně s délkou antény L , tedy $\lambda_r \propto L$. Nicméně vidíme, že body na obrázku 6.7 neleží přesně na proložené přímce. Důvodem je disperze reálné části efektivního indexu lomu n_{eff} (zaveden v kapitole 4), který se mění v intervalu od $n_{\text{eff}} = 1,65$ pro $\lambda_r = 623$ nm po $n_{\text{eff}} = 1,49$ pro $\lambda_r = 1078$ nm.

Můžeme tedy tvrdit, že $\lambda_r \propto n_{\text{eff}} L$. Avšak vztah (4.68), který lze poměrně úspěšně použít pro oblast středního infračerveného spektra [4], [5], ve viditelné oblasti spektra neplatí. Dle tohoto vztahu by pro dosažení rezonancí na vlnových délkách uvedených v tabulce 6.1 byly třeba antény, jejichž délka L by byla přibližně o 100 nm až 120 nm



Obrázek 6.7: Závislost rezonanční vlnové délky λ_r a intenzity elektrického pole I_{enh} v okolí antény na délce antény L . Šířka W i výška antény H je 60 nm. Odchylka λ_r od proložené přímky je způsobena závislostí efektivního indexu lomu na vlnové délce.

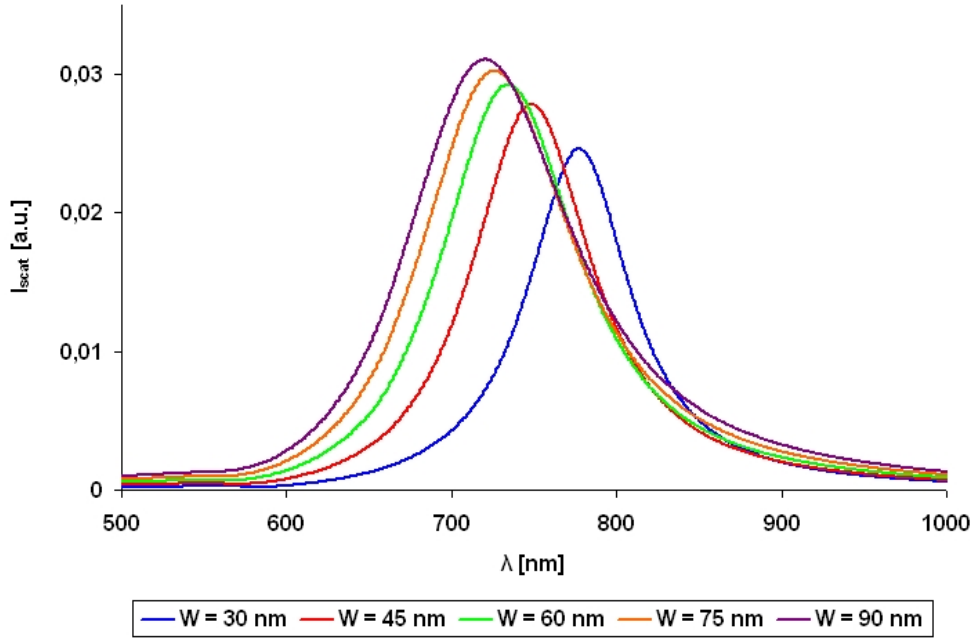
větší. Respektive, antény o délkách L by dle vztahu (4.68) rezonovaly na menších vlnových délkách, než jaké jsou uvedeny v tabulce 6.1.

Lokalizovaná plazmonová rezonance je vyvolána kolektivními podélnými oscilacemi vodivostních elektronů v kovové nanostruktuře, při nichž v nanostruktuře vzniká stojatá vlna. V okolí nanostruktury dochází k zesílení elektrického pole. Jak vidíme z obrázku 6.5, elektrické pole je zesíleno v poměrně velkém okolí antény, ve směru polarizace to je řádově několik desítek nanometrů.

Možným vysvětlením posunu rezonance k větším vlnovým délkám je průnik elektromagnetického pole z kovové antény do nevodivého okolí antény, kde je pole exponenciálně tlumeno, tedy jev do jisté míry podobný skinovému jevu. Uzly stojaté vlny se nenacházejí na rozhraní nanostruktury geometrické délky L , resp. optické délky $n_{\text{eff}}L$, ale vně nanostruktury v oblasti zesíleného elektromagnetického pole. Vzdálenost mezi uzly stojaté vlny je tak L_{eff} . Protože $L_{\text{eff}} > L$ dochází k posunu rezonance k větším vlnovým délkám. Vztah (4.68) je tak možné užít v pozměněné podobě $\lambda_r = 2n_{\text{eff}}L_{\text{eff}}$. Nicméně otázkou stále zůstává, jak co nejpřesněji odhadnout velikost L_{eff} .

V oblasti středního infračerveného spektra jsou rozměry antén podstatně větší, řádově v jednotkách mikrometrů a proto $L_{\text{eff}} \doteq L$ a vztah (4.68) platí beze změny.

Na obrázku 6.6 je zobrazen graf zesílení intenzity elektrického pole v blízkém okolí antén délek L pro jejich rezonanční vlnové délky λ_r . Faktor zesílení elektrického pole hraje důležitou roli při využití lokalizované plazmonové rezonance v senzorech a spektroskopických metodách, např. povrchem zesílené ramanovské spektroskopii (SERS). Jak je patrné z obrázku 6.6, pro antény délky 60 a 80 nm je zesílení elektrického pole poměrně malé. S rostoucí délkou antény L roste i zesílení elektrického pole v okolí antény. Pro antény délky 130 a 150 nm se vyskytuje lokální minimum, zesílení elektrického pole je menší než pro anténu délky 100 nm. Výskyt tohoto minima je nečekaný, neboť délkám antén 130 a



Obrázek 6.8: Vlnová spektra rozptýleného světla pro různé šířky antén W . Délka antény L je 130 nm a výška antény H je 60 nm. Intenzita rozptýleného světla I_{scat} , prošlého detektorem o rozměrech $(600 \times 600) \text{ nm}^2$ umístěným 600 nm nad rozhraním antény a substrátu, je normována k intenzitě dopadajícího světla.

150 nm odpovídají rezonanční vlnové délky 734 a 790 nm, pro něž se hodnota koeficientu absorpce k_{eff} blíží minimu. Z obrázku 6.6 je také patrný exponenciální pokles intenzity elektrického pole s rostoucí vzdáleností od antény.

6.4.2. Vliv šířky antény W a výšky antény H

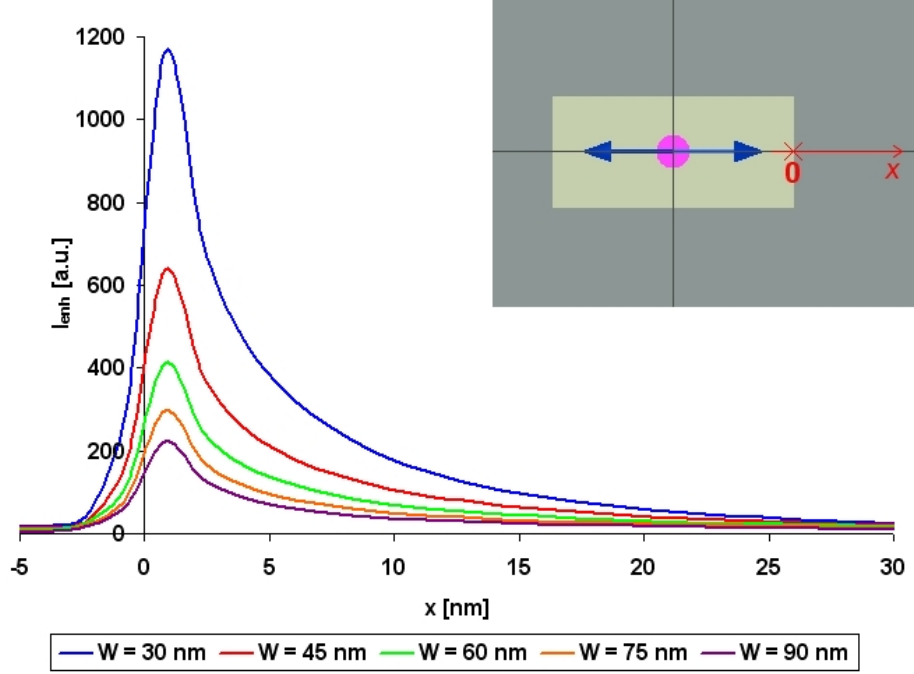
V kapitole 6.4.1 jsme prostřednictvím první série simulací prošetřili, jak závisí rezonanční vlnová délka λ_r a intenzita elektrického pole I_{enh} v okolí antény na délce antény L . Nyní se podíváme na to, jak zbylé dva rozměry ovlivňují vlastnosti nanoantény.

Návrh simulací

V druhé sérii simulací jsme ponechali konstantní délku antény $L = 130 \text{ nm}$ a výšku antény $H = 60 \text{ nm}$. Šířku antény W jsme v jednotlivých simulacích zvolili 30, 45, 60, 75 a 90 nm. Navíc jsme ještě provedli dvě simulace pro antény o šířce¹¹ 500 a 750 nm. Veškerá nastavení simulační oblasti, zdroje elektromagnetické vlny, a monitorů jsme nechali stejné jako v případě první série simulací pro různé délky antény (kapitola 6.4.1). Schéma simulací je na obrázku 6.1.

V třetí sérii simulací jsme ponechali konstantní délku antény $L = 130 \text{ nm}$ a šířku antény $W = 60 \text{ nm}$. Výšku antény H jsme v jednotlivých simulacích zvolili 30, 45, 60, 75 a 90 nm. Veškerá nastavení simulací jsme ponechali stejná jako v předchozích dvou sériích simulací.

¹¹zde by bylo vhodnější užít spíše pojmu „nanodrát o délce“, ale to by mohlo vést k nejasnostem ohledně geometrie nanodrátu, respektive antény



Obrázek 6.9: Normovaná intenzita elektrického pole I_{enh} v blízkosti antény šířky W pro rezonanční vlnové délky λ_r . Délka antény L je 130 nm a výška antény H je 60 nm. I_{enh} je odečítáno na rozhraní mezi anténou a substrátem ($z = 0$). x označuje vzdálenost od antény. I_{enh} je normována k intenzitě dopadajícího světla. Červený křížek ve vloženém obrázku označuje bod, v němž klademe $x = 0$ a osa x pak body, v nichž odečítáme I_{enh} .

Vyhodnocení simulací

Z obrázku 6.8 vidíme, že rezonanční vlnová délka se s rostoucí šířkou antény W posouvá k menším vlnovým délkám. Je to výsledek, který lze po srovnání 2D a 3D simulace očekávat. Jak je uvedeno v kapitole 6.3, při 2D simulaci je třetí rozměr chápán jako nekonečný. Tedy z antény se stává nanodráť. Rezonanční vlnová délka nanodráty o rozměrech $(130 \times \infty \times 60) \text{ nm}^3$ stanovená prostřednictvím 2D simulace při OP PML je $\lambda_r = 644 \text{ nm}$ (kapitola 6.3). V případě 3D simulace pro nanodráť o rozměrech $(130 \times 500 \times 60) \text{ nm}^3$ při OP PML jsme dospěli k rezonanční vlnové délce $\lambda_r = 664 \text{ nm}$. Pro nanodráť o rozměrech $(130 \times 750 \times 60) \text{ nm}^3$ byla $\lambda_r = 652 \text{ nm}$. Jak vidíme, s rostoucí šířkou antény bychom byli schopni se jistě ještě více přiblížit výsledku 2D simulace, tj. $\lambda_r = 644 \text{ nm}$.

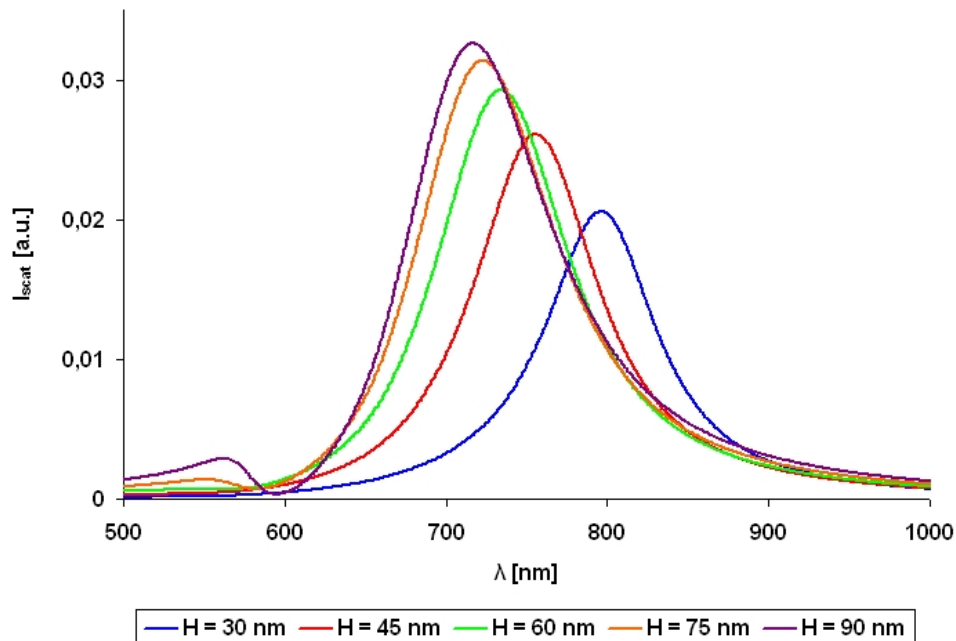
Z obrázku 6.9 je patrné, že intenzita lokálního elektrického pole I_{enh} v okolí antény s rostoucí šířkou antény poměrně výrazně klesá. Závislost I_{enh} na šířce W bude ukázána dále.

Z obrázků 6.10 a 6.11 je patrné, že vliv výšky antény H na rezonanční vlnovou délku λ_r a intenzitu elektrického pole I_{enh} v okolí antény je obdobný jako v případě šířky antény W . Tedy s rostoucí výškou antény H se posouvá rezonanční vlnová délka λ_r k menším vlnovým délkám a klesá intenzita elektrického pole I_{enh} v okolí antény.

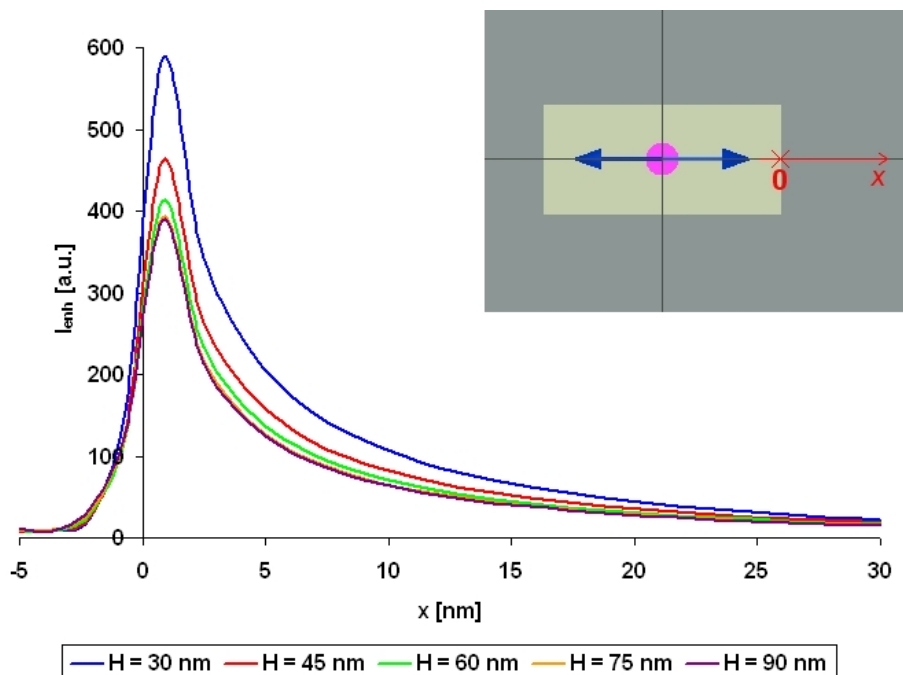
Porovnejme naše zjištění pro šířku antény W a výšku antény H . Na obrázku 6.12 a v tabulce 6.2 jsou zobrazeny hodnoty rezonanční vlnové délky λ_r a intenzity elektrického pole I_{enh} v okolí antény. Z obrázku a tabulky lze zjistit následující skutečnosti:

Šířka antény W ovlivňuje rezonanční vlnovou délku λ_r méně než výška antény H . Závislost λ_r na W i H lze popsat polynomem třetího stupně. Šířka antény W mnohem

6.4. REZONANČNÍ VLASTNOSTI ZLATÝCH ANTÉN NA SKLENĚNÉM SUBSTRÁTU



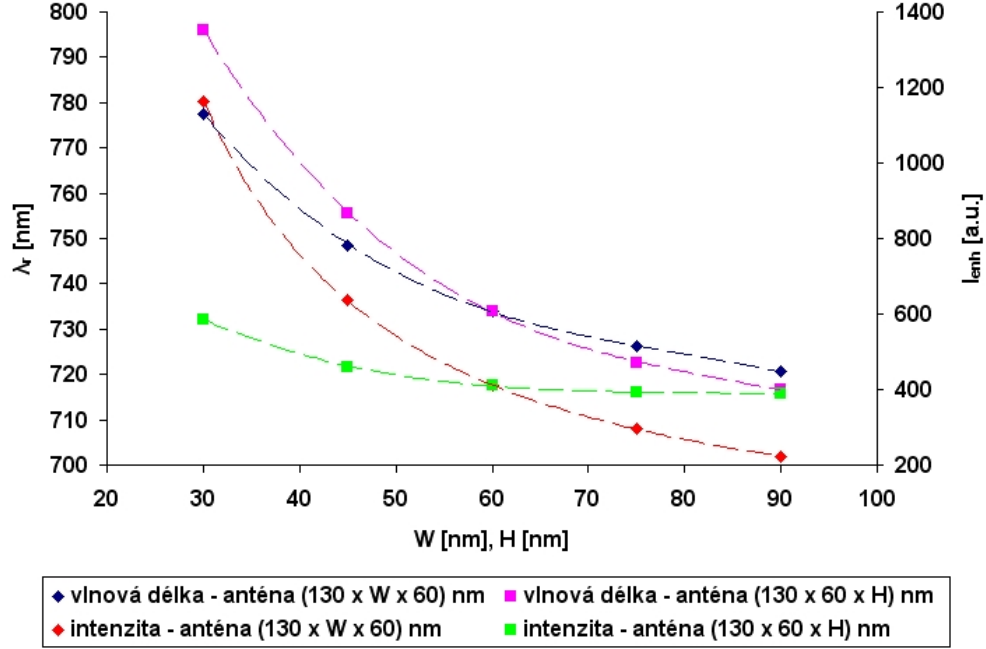
Obrázek 6.10: Vlnová spektra rozptýleného světla pro různé výšky antén H . Délka antény L je 130 nm a šířka antény W je 60 nm. Intenzita rozptýleného světla I_{scat} , prošlého detektorem o rozměrech $(600 \times 600) \text{ nm}^2$ umístěným 600 nm nad rozhraním antény a substrátu, je normována k intenzitě dopadajícího světla.



Obrázek 6.11: Normovaná intenzita elektrického pole I_{enh} v blízkosti antény výšky H pro rezonanční vlnové délky λ_r . Délka antény L je 130 nm a šířka antény W je 60 nm. I_{enh} je odečítáno na rozhraní mezi anténou a substrátem ($z = 0$). x označuje vzdálenost od antény. I_{enh} je normována k intenzitě dopadajícího světla. Červený křížek ve vloženém obrázku označuje bod, v němž klademe $x = 0$ a osa x pak body, v nichž odečítáme I_{enh} .

Tabulka 6.2: Rezonanční vlnové délky λ_r a maximální intenzity elektrického pole I_{enh} v blízkosti antény pro různé šířky antén W a výšky antén H .

W [nm]	λ_r [nm]	$I_{\text{enh,max}}$ [a.u.]	H [nm]	λ_r [nm]	$I_{\text{enh,max}}$ [a.u.]
30	778	1162	30	796	586
45	749	637	45	756	461
60	734	412	60	734	412
75	726	297	75	723	391
90	721	223	90	717	388



Obrázek 6.12: Srovnání závislosti rezonanční vlnové délky λ_r a intenzity elektrického pole v okolí antény I_{enh} na šířce antény W , respektive výšce antény H pro anténu o délce $L = 130$ nm a výšce $H = 60$ nm, respektive o šířce $W = 60$ nm. I_{enh} je normována k intenzitě dopadajícího světla. Body popisující závislost λ_r na W a H a závislost I_{enh} na H jsou proloženy polynomem třetího stupně. Body popisující závislost I_{enh} na W jsou proloženy mocninou křivkou. Exponent této mocniné křivky je $-3/2$.

více ovlivňuje intenzitu elektrického pole I_{enh} v okolí antény než výška antény H . Závislost I_{enh} na H lze také popsat polynomem třetího stupně. Závislost I_{enh} na W lze popsat mocninou funkcí ve tvaru $I_{\text{enh}} = AW^{-\frac{3}{2}}$, kde A je konstanta úměrnosti.

6.5. Nanokrystalický diamant v okolí antén

V kapitole 6.4 jsme prošetřili rezonanční vlastnosti zlaté nanoantény na skleněném substrátu. Nyní se zaměříme na to, jak se tyto rezonanční vlastnosti nanoantény změní, umístíme-li do jejího okolí strukturu tvořenou nanokrystalickým diamantem (NCD, nanocrystalline diamond).

6.5.1. Nanokrystalický diamant

Nanokrystalický diamant (NCD) vzniká pomocí plazmatem iniciované chemické depozice z plynné fáze (PE-CVD, Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition). Základní myšlenkou výroby NCD je rozpad metanu v radiofrekvenčním plazmatu při frekvenci 13,56 MHz a při tlacích v rozmezí 40-200 Pa. NCD lze v podstatě považovat za soubor krystalitů diamantového prachu [16].

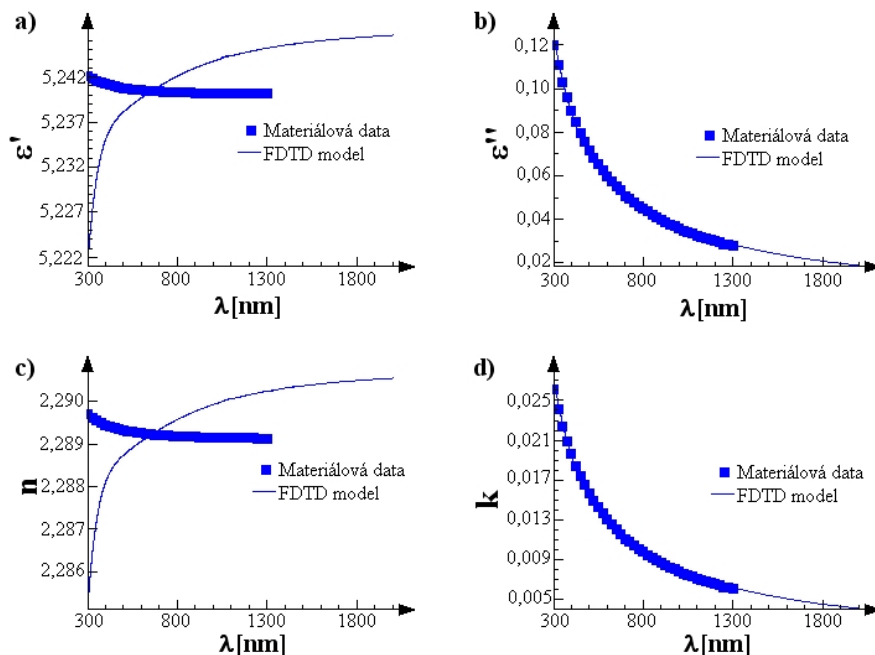
Nejmenší tloušťka vyrobitelné vrstvy NCD je dána velikostí jeho zrna. V dnešní době lze vyrobit NCD s velikostí zrna kolem 30 nm. Není problém vyrobit i tzv. ultranankrystalický (UNCD) diamant s velikostí zrna v jednotkách nanometrů a připravit tak vrstvy diamantu o tloušťce do 10 nm, avšak vrstvy UNCD mají velký koeficient absorpce a svými optickými vlastnostmi se tak spíše podobají kovu [25] a pro naše aplikace se tak nehodí.

Nanokrystalický diamant je svými vlastnostmi blízký monokrystalickému diamantu. NCD má hladký povrch, mechanické vlastnosti blízké monokrystalickému diamantu, je transparentní v širokém intervalu vlnových délek a ve viditelné oblasti spektra téměř nevykazuje absorpci [13]. NCD je navíc biokompatibilní a chemicky inertní. Také byl prokázán příznivý vliv NCD na organické tkáně, kdy přítomnost NCD ve tkáni zabránila šíření zánětu nebo toxickým biochemickým reakcím [16].

Díky svým biologickým vlastnostem nachází NCD své využití především v biologii, biochemii, nebo medicíně. NCD se ukazuje být vhodným substrátem pro růst a studium buněk. Také se ukazuje, že aplikace nanokrystalických povlaků na kloubní náhrady a jiné implantáty, zvyšuje šance, že implantát bude lidským tělem přijat. Navíc NCD povlak zabraňuje případné alergické reakci těla na legující přísady v chirurgické oceli, především na chrom a nikl [16].

6.5.2. Dielektrická funkce nanokrystalického diamantu

Dielektrická funkce nanokrystalického diamantu není součástí interní materiálové databáze programu Lumerical. Dielektrickou funkci NCD jsme stanovili pomocí Sellmeierovy rovnice (3.34). Empirické konstanty A , B , C jsme čerpali z [9], kde byly uvedeny konstanty A , B , C pro 10 různých vzorků NCD. Prvních pět vzorků bylo vytvořených za depoziční teploty 610 °C a vzájemně se odlišovaly obsahem kyslíku. Obsah kyslíku v jednotlivých vzorcích činil 0,2, 2, 4, 6 a 8 %. Druhá pětice vzorků NCD obsahovala 6 % kyslíku a vzájemně se odlišovala depoziční teplotou, při níž vznikla. Depoziční teploty pro jednotlivé vzorky byly 570, 590, 610, 620 a 650 °C. Empirické konstanty A a B se pro jednotlivé vzorky odlišovaly jen minimálně, řádově v jednotkách procent. Konstanta C , která ve vztahu (3.34) charakterizuje útlum elektromagnetické vlny při průchodu NCD, se však pro jednotlivé vzorky lišila výrazně, v limitních případech téměř až o 100 %. Proto jsme se rozhodli na základě těchto deseti vzorků vytvořit pro materiálovou databázi model „průměrného“ nanokrystalického diamantu.



Obrázek 6.13: Dielektrická funkce a index lomu *průměrného* nanokrystalického diamantu tak, jak byly zobrazeny programem Lumerical. a) reálná část dielektrické funkce ε' , b) imaginární část dielektrické funkce ε'' , c) index lomu n , d) index absorpce k . Modré body jsou hodnoty vypočtené pomocí Sellmeierovy rovnice a následně zadané do materiálové databáze programu. Program proložil body křivkou tak, aby byly splněny Kramersovy-Kronigovy relace.

Pro každý z deseti vzorků, uvedených v [9], jsme pomocí Sellmeierovy rovnice (3.34), do které jsme dosadili konstanty A, B, C získané z [9], stanovili dielektrickou funkci v intervalu vlnových délek 300 až 1300 nm. Získali jsme tak dielektrickou funkci ε pro každý z deseti vzorků NCD. Z těchto deseti dielektrických funkcí jsme aritmetickým průměrem stanovili dielektrickou funkci „*průměrného*“ nanokrystalického diamantu.

Hodnoty dielektrické funkce „*průměrného*“ NCD pro vlnové délky v intervalu 300 až 1300 nm jsme uložili do textového souboru a importovali do materiálové databáze programu Lumerical. Program proložil zadanými hodnotami dielektrické funkce křivku tak, aby byly splněny Kramersovy-Kronigovy relace. Dielektrická funkce a index lomu „*průměrného*“ NCD je zobrazena na obrázku 6.13. Křivky popisující dielektrickou funkci a komplexní index lomu NCD se od zadaných hodnot téměř neliší¹².

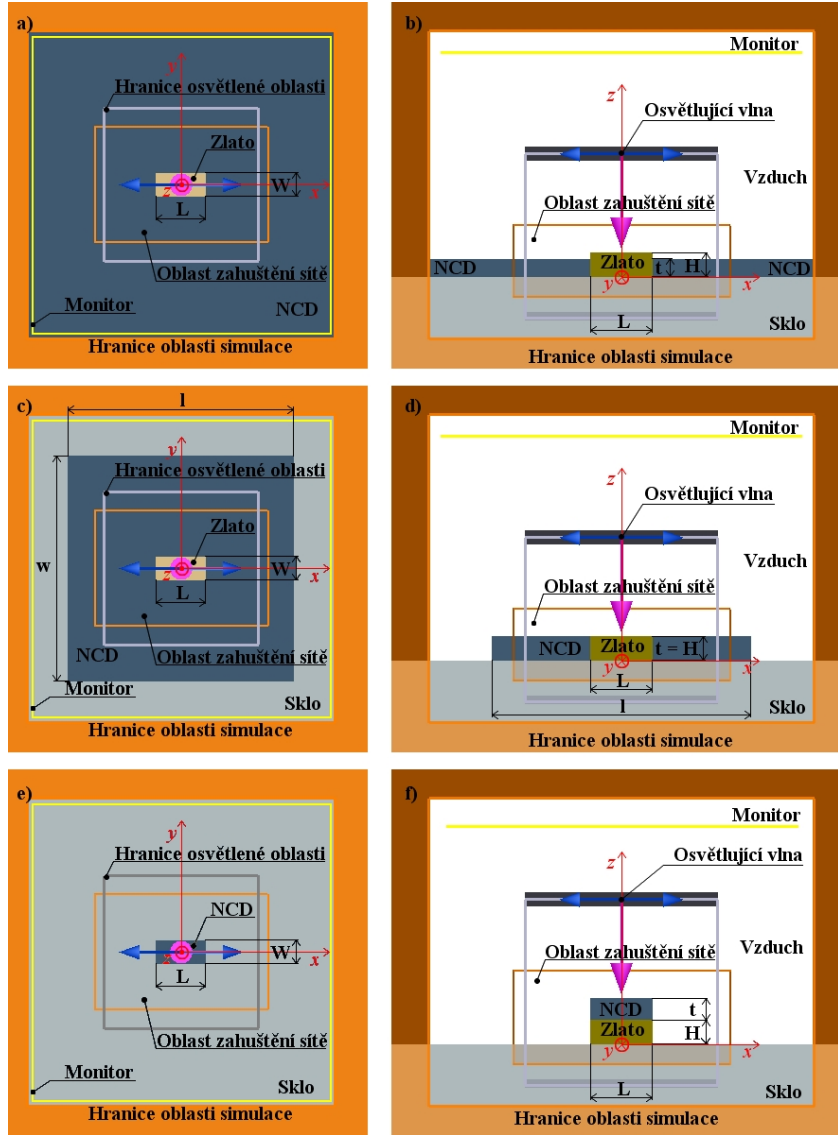
6.5.3. Tenká vrstva diamantu

Návrh simulací

Vytvořili jsme tři série simulací, v nichž jsme do okolí zlaté nanoantény o rozměrech $(130 \times 60 \times 60) \text{ nm}^3$, která se nacházela na skleněném substrátu, umístili tenkou vrstvu NCD. Veškerá nastavení parametrů simulace byla shodná jako v případě simulací bez

¹²v případě reálné části dielektrické funkce ε' a indexu lomu n je relativní odchylka proložené přímky od zadaných hodnot nejvýše 0,4 % pro ε' a 0,2 % pro n

6.5. NANOKRYSTALICKÝ DIAMANT V OKOLÍ ANTÉN



Obrázek 6.14: Návrh simulací tenké vrstvy NCD v okolí zlaté nanoantény na skleněném substrátu. a) Nekonečná NCD vrstva o tloušťce t , pohled shora, b) pohled z boku, c) konečná NCD vrstva o rozměrech $l \times w \times t$, pohled shora, d) pohled z boku, e) vrstva NCD o tloušťce t na povrchu nanoantény, pohled shora, f) pohled z boku.

NCD (kapitola 6.2 a 6.4.1). Jedinou změnou bylo zvětšení rozměrů oblasti simulace na $(1000 \times 1000 \times 800) \text{ nm}^3$.

V první sérii těchto simulací byly rozměry tenké vrstvy NCD v x -ovém a y -ovém směru větší, než byla velikost simulační oblasti¹³, a její tloušťku t jsme jednotlivých v simulacích volili 10, 25, 60, 100, 150 a 200 nm. Schéma simulace je na obrázku 6.14 a), b).

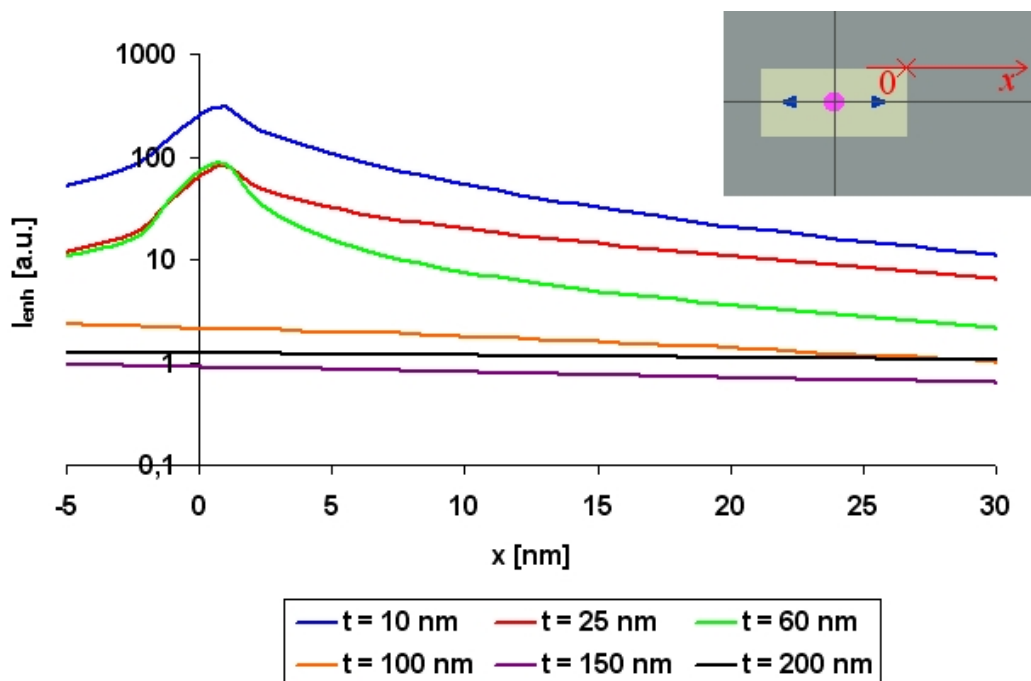
V druhé sérii simulací jsme u vrstvy NCD zafixovali její tloušťku t na 60 nm a měnili její rozměry ve směru osy x a y . Rozměry vrstvy NCD v těchto směrech jsme postupně zvolili (250×250) , (400×400) , (500×500) , (600×600) a $(750 \times 750) \text{ nm}^2$. Nanoanténa se nacházela ve středu tenké vrstvy. Schéma simulace je na obrázku 6.14 c), d).

¹³NCD vrstva se tak v simulaci jevila jako nekonečná

Tabulka 6.3: Srovnání rezonanční vlnové délky zlaté antény λ_r a intenzity elektrického pole I_{enh} , odečítané nad rohem antény na rozhraní NCD-vzduch, pro nekonečnou vrstvu NCD o tloušťce t , pro vrstvu NCD o tloušťce t umístěné pouze na nanoanténě a pro vrstvu NCD o rozměrech $(l \times w \times 60) \text{ nm}^3$.

nekonečná vrstva NCD			vrstva NCD na anténě			vrstva NCD $(l \times w \times 60) \text{ nm}^3$		
$t \text{ [nm]}$	$\lambda_r \text{ [nm]}$	$I_{\text{enh}} \text{ [a.u.]}$	$t \text{ [nm]}$	$\lambda_r \text{ [nm]}$	$I_{\text{enh}} \text{ [a.u.]}$	$l = w \text{ [nm]}$	$\lambda_r \text{ [nm]}$	$I_{\text{enh}} \text{ [a.u.]}$
10	833	305	10	749	288	250	1018	239
25	912	80,0	20	761	111	400	1062	133
60	1042	88,5	40	773	30,7	500	1048	114
100	1159	2,53	60	784	13,5	600	1086	124
150	1185	1,39	90	789	4,52	750	1109	118
200	1214	1,45	150	786	8,10			
			200	790	16,5			

V třetí sérii simulací jsme umístili tenkou vrstvu NCD pouze na povrch antény. Tloušťku této vrstvy t jsme postupně volili 10, 20, 40, 60, 100, 150 a 200 nm. Schéma simulace je na obrázku 6.14 e), f).

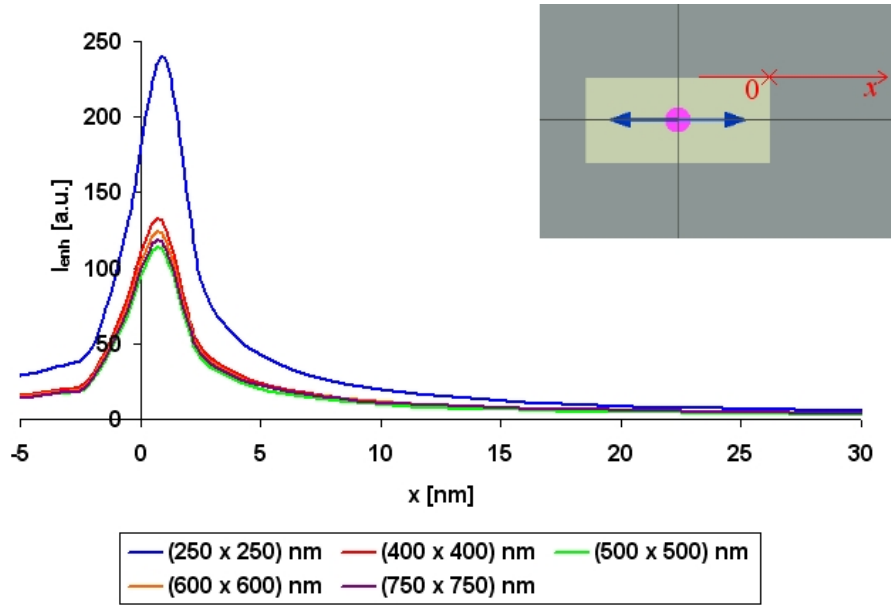


Obrázek 6.15: Normovaná intenzita elektrického pole I_{enh} v blízkosti zlaté antény o rozměrech $(130 \times 60 \times 60) \text{ nm}^3$. V okolí antény se nachází vrstva NCD o tloušťce t . I_{enh} je odečítáno na rozhraní mezi vrstvou NCD a vzduchem ($z = t$). x označuje vzdálenost od antény. I_{enh} je normována k intenzitě dopadajícího světla. Červený křížek ve vloženém obrázku označuje bod, v němž klademe $x = 0$ (roh antény) a osa x pak body, v nichž odečítáme I_{enh} .

Vyhodnocení simulací

Jak je patrné z tabulky 6.3, přítomnost vrstvy nanokrystalického diamantu (NCD) výrazně ovlivňuje rezonanční vlastnosti nanoantény. Elektrické pole v okolí antény, které se

6.5. NANOKRYSTALICKÝ DIAMANT V OKOLÍ ANTÉN



Obrázek 6.16: Normovaná intenzita elektrického pole I_{enh} v blízkosti zlaté antény o rozměrech $(130 \times 60 \times 60) \text{ nm}^3$. V okolí antény se nachází vrstva NCD o délce l , šířce w a tloušťce $t = 60 \text{ nm}$. I_{enh} je odečítáno na rozhraní mezi vrstvou NCD a vzduchem ($z = t$). x označuje vzdálenost od antény. I_{enh} je normována k intenzitě dopadajícího světla. Červený křížek ve vloženém obrázku označuje bod, v němž klademe $x = 0$ (roh antény) a osa x pak body, v nichž odečítáme I_{enh} .

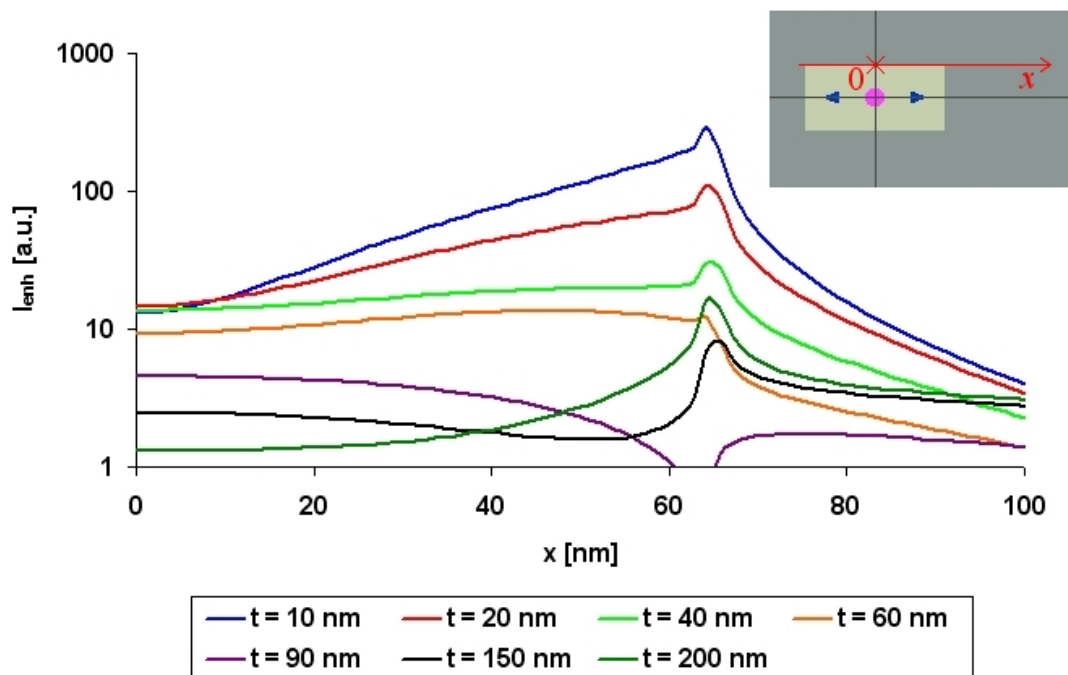
původně nacházelo ve vzduchu, se nyní nachází v opticky hustším diamantu o indexu lomu $n \doteq 2,3$. To vede k červenému posuvu rezonanční vlnové délky. NCD má narozdíl od skla a vzduchu nenulový index absorpce k . Toto, společně s vyšším indexem absorpce zlata pro vyšší vlnové délky, způsobuje menší zesílení elektrického pole I_{enh} než v případech bez vrstvy NCD.

S ohledem na možnou aplikaci takovýchto struktur ve spektroskopii, budeme se nadále zajímat o intenzitu elektrického pole v místech, kde by se nacházel vzorek. Zaměříme se tedy na rozhraní vrstvy NCD a vzduchu.

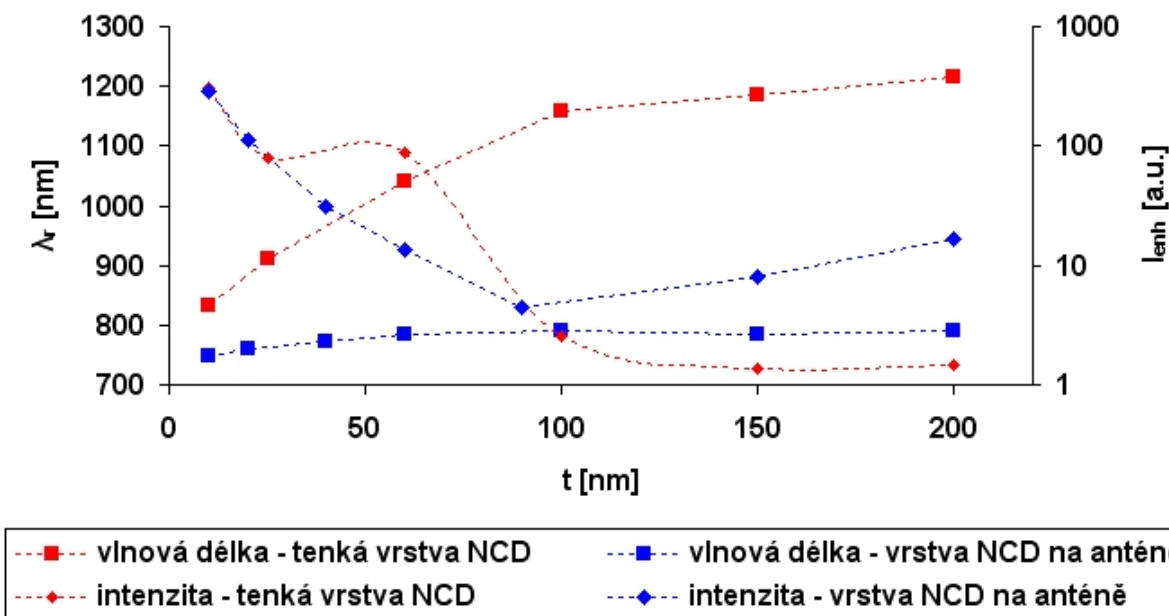
K největším zesílením elektrického pole dochází poblíž hran a vrcholů antén. Z tabulky 6.3 a obrázku 6.15 vidíme, že s rostoucí vzdáleností rozhraní NCD-vzduch od nanoantény klesá intenzita elektrického pole I_{enh} na rozhraní NCD-vzduch. Z obrázku 6.15 vidíme, že pro tloušťku t vrstvy NCD větší než 100 nm intenzita el.pole nenabývá maximální hodnoty nad rohy antén (na obrázku 6.15 tomu odpovídá $x = 0$). To je způsobeno tím, že pro tyto tloušťky vrstev je intenzita lokálního pole I_{enh} na rozhraní NCD-vzduch menší než intenzita pole rozptýleného anténou I_{scat} .

Ponechme tloušťku vrstvy NCD stejnou, jako je výška antény, tedy 60 nm . Pro vrstvu NCD, jejíž plošné rozměry jsou nekonečné¹⁴ dosahuje v rohu antény normovaná intenzita elektrického pole I_{enh} hodnoty $88,5$. Z tabulky 6.3 je patrné, že pokud budeme omezovat plošné rozměry vrstvy NCD, bude se mírně posouvat rezonanční vlnová délka λ_r k menším vlnovým délkám. Navíc s menšími plošnými rozměry vrstvy NCD, roste faktor

¹⁴ plošné rozměry vrstvy jsou větší než rozměry oblasti simulace a elektrické pole je ve vrstvě utlumeno dříve, než dosáhne okraje simulační oblasti. Během simulace jsou plošné rozměry vrstvy stejné jako rozměry simulační oblasti.



Obrázek 6.17: Normovaná intenzita elektrického pole I_{enh} v blízkosti zlaté antény o rozměrech $(130 \times 60 \times 60) \text{ nm}^3$. Na povrchu antény se nachází vrstva NCD o tloušťce t . I_{enh} je odečítáno na rozhraní mezi vrstvou NCD a vzduchem ($z = 60 \text{ nm} + t$). x označuje vzdálenost od antény. I_{enh} je normována k intenzitě dopadajícího světla. Červený křížek ve vloženém obrázku označuje bod, v němž klademe $x = 0$ a osa x pak body, v nichž odečítáme I_{enh} .



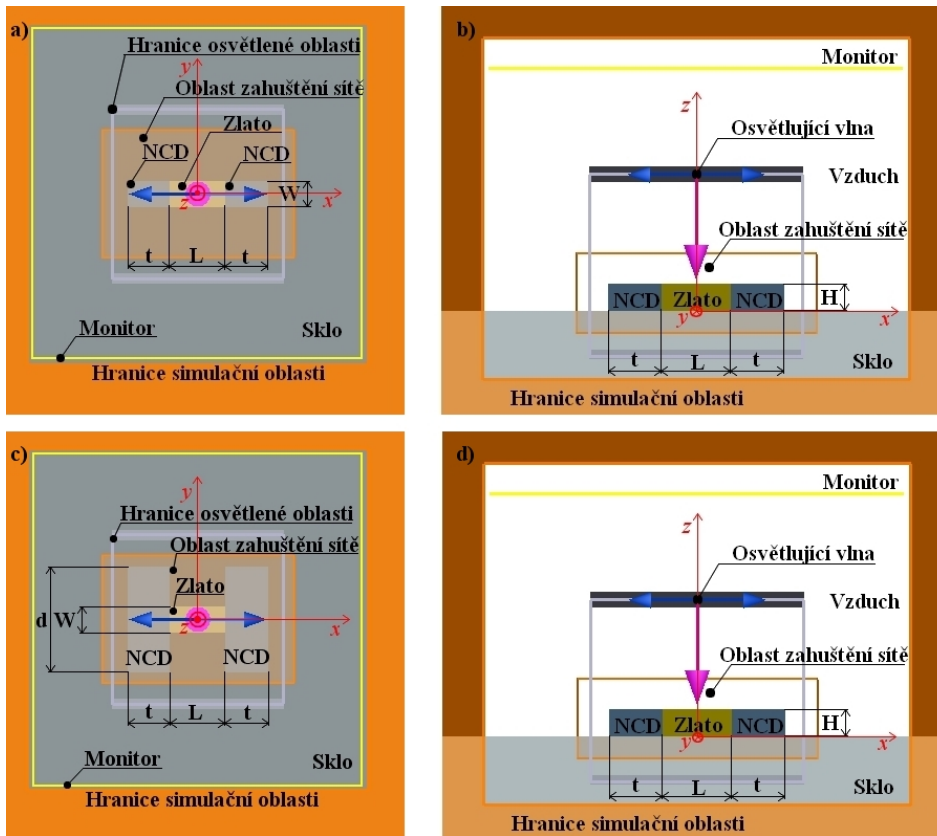
Obrázek 6.18: Srovnání rezonanční vlnové délky antény λ_r a intenzity elektrického pole I_{enh} (odečítané nad rohem antény na rozhraní NCD-vzduch) pro nekonečnou vrstvu NCD o tloušťce t a pro vrstvu NCD o tloušťce t umístěné pouze na nanoanténě.

6.5. NANOKRYSTALICKÝ DIAMANT V OKOLÍ ANTÉN

zesílení elektrického pole. Pro vrstvu NCD o rozměrech $(250 \times 250 \times 60) \text{ nm}^3$ je intenzita elektrického pole v rohu antény zesílena již 239 krát.

Umístíme-li vrstvu NCD pouze na zlatou nanoanténu, je posuv rezonanční vlnové délky mnohem menší než v předchozích dvou případech. Tento malý posuv je způsoben absencí NCD v oblastech největšího zesílení elektrického pole. Intenzita elektrického pole na rozhraní NCD-vzduch je srovnatelná jako v případě vrstvy NCD okolo antény. Z obrázku 6.17 je patrné, že pro vrstvy NCD do tloušťky 60 nm umístěné pouze na anténě je faktor zesílení intenzity elektrického pole podél celé nanoantény alespoň 10.

Ze srovnání rezonančních vlastností nekonečné vrstvy NCD a vrstvy NCD umístěné pouze na anténě (obrázek 6.18) je patrné, že po umístění vrstvy NCD na anténu, je červený posuv rezonanční vlnové délky menší než v případě nekonečné vrstvy NCD v okolí antény. Nicméně pro vrstvy o tloušťce do 90 nm dosahujeme většího faktoru zesílení elektrického pole pro nekonečnou vrstvu NCD. Z obrázku 6.18 také vidíme, že pro vrstvy NCD o tloušťce větší než 90 nm umístěné na anténě mírně roste intenzita elektrického pole na rozhraní NCD-vzduch. Zesílení elektrického pole na tomto rozhraní je způsobeno požadavkem na splnění okrajových podmínek na rozhraní dvou různých prostředí, které jsou vyjádřeny vztahy (2.11)-(2.14).



Obrázek 6.19: Návrh simulací nanotyčí z NCD v okolí nanoantény. Nanotyče o rozměru $t \times W \times H$ umístěné podélně čelům antény, a) pohled shora, b) pohled z boku. Nanotyče o rozměru $t \times d \times H$ umístěné napříč čelům antény, c) pohled shora, d) pohled z boku.

Tabulka 6.4: Srovnání rezonanční vlnové délky zlaté antény λ_r a intenzity elektrického pole I_{enh} v okolí antény pro diamantové nanotyče o rozměrech $(t \times 60 \times 60)$ a $(50 \times d \times 60)$ nm³ umístěné do kontaktu s anténou. I_{enh} byla odečítána v rohu antény na rozhraní NCD-vzduch ($z = 60$ nm).

Nanotyč z NCD $(t \times 60 \times 60)$ nm ³			Nanotyč z NCD $(50 \times d \times 60)$ nm ³		
t nm	λ_r [nm]	I_{enh} [a.u.]	d nm	λ_r [nm]	I_{enh} [a.u.]
10	763	214	50	822	157
25	791	165	100	874	177
50	822	161	150	898	213
75	848	248	200	897	281
100	851	169	250	904	284
125	856	169	300	920	236
150	866	239	400	913	298
175	863	165			
200	863	162			

6.5.4. Nanotyče z NCD v okolí antény

Návrh simulací

Vytvořili jsme dvě série simulací, v nichž jsme umístili diamantové nanotyče na čelo zlaté antény o rozměrech $L = 130$ nm a $W = H = 60$ nm. Nastavení parametrů simulací je stejné jako v případě simulací pro NCD vrstvy (kapitola 6.5.3).

V první sérii simulací jsme na čela antény umístili diamantové nanotyče, jejichž šířka i výška byly stejné jako šířka a výška antény, tj. 60 nm. Délku tyče t jsme v jednotlivých simulacích zvolili 10, 25, 50, 75, 100, 125, 150, 175 a 200 nm. Schéma simulace je na obrázku 6.19 a), b).

V druhé sérii simulací jsme diamantové nanotyče umístili kolmo k čelům antény. Výška nanotyče byla stejná jako výška antény, tj. 60 nm. Šířku tyče t jsme ve všech simulacích zvolili 50 nm. Délku tyče d jsme v jednotlivých simulacích volili 100, 150, 200, 250, 300 a 400 nm. Schéma simulace je na obrázku 6.19 c), d).

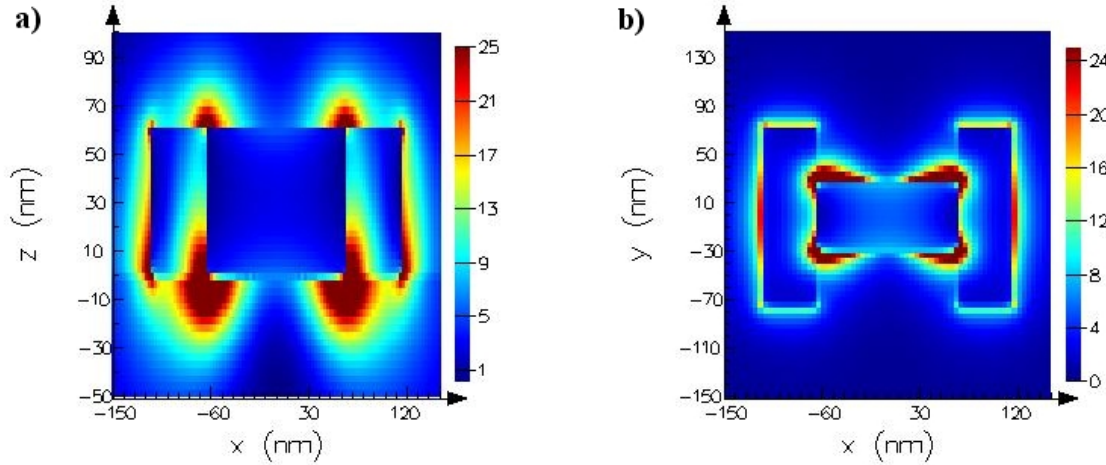
Vyhodnocení simulací

Umístění diamantových nanotyčí na čela nanoantén má podobný vliv na rezonanční vlastnosti zlaté nanoantény jako umístění vrstvy nanokrystalického diamantu do okolí antény. Jak je vidět z obrázku 6.20, elektrické pole je zesíleno jednak v okolí nanoantény a jednak také na rozhraní nanokrystalického diamantu a vzduchu. Toto zesílení na rozhraní NCD-vzduch je důsledkem okrajových podmínek na rozhraní mezi dvěma různými prostředími, vyjádřenými vztahy (2.11)-(2.14).

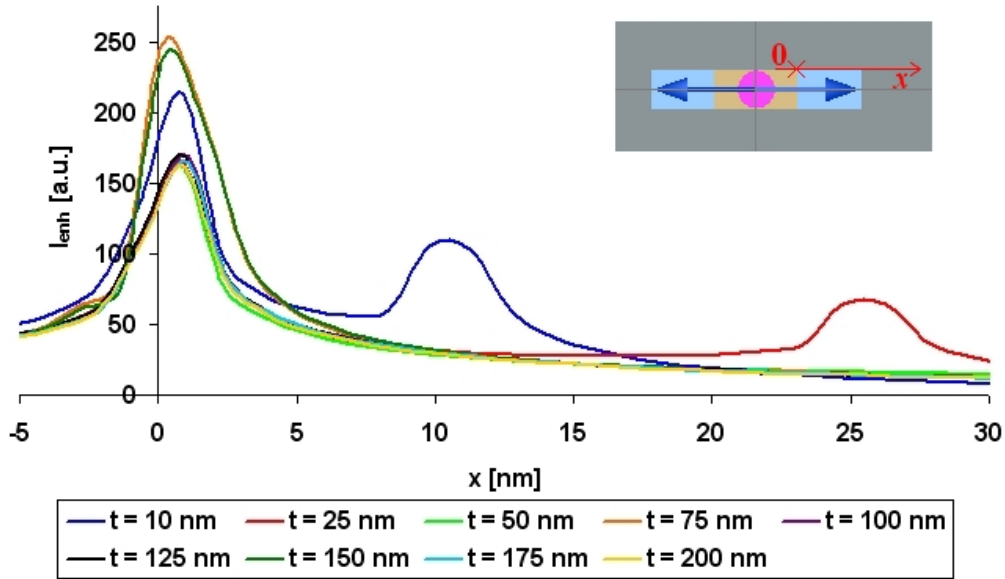
V případě diamantových nanotyčí se tedy v okolí antény nachází více míst, která mohou výrazněji zesilovat elektrické pole. Těmito místy jsou nejen rozhraní mezi anténou a diamantovou nanotyčí, ale také rozhraní mezi nanotyčí a vzduchem.

Z tabulky 6.4 je patrný vliv rozměrů diamantových nanotyčí na rezonanční vlnovou délku λ_r . Hodnota λ_r se s rostoucím rozměrem nanotyčí posouvá k větším vlnovým délkám. Nicméně, tento posuv se projevuje výrazněji pro změnu rozměru tyče ve směru osy y , než pro změnu rozměru tyče ve směru polarizace dopadajícího světla, tedy ve směru osy x .

6.5. NANOKRYSTALICKÝ DIAMANT V OKOLÍ ANTÉN

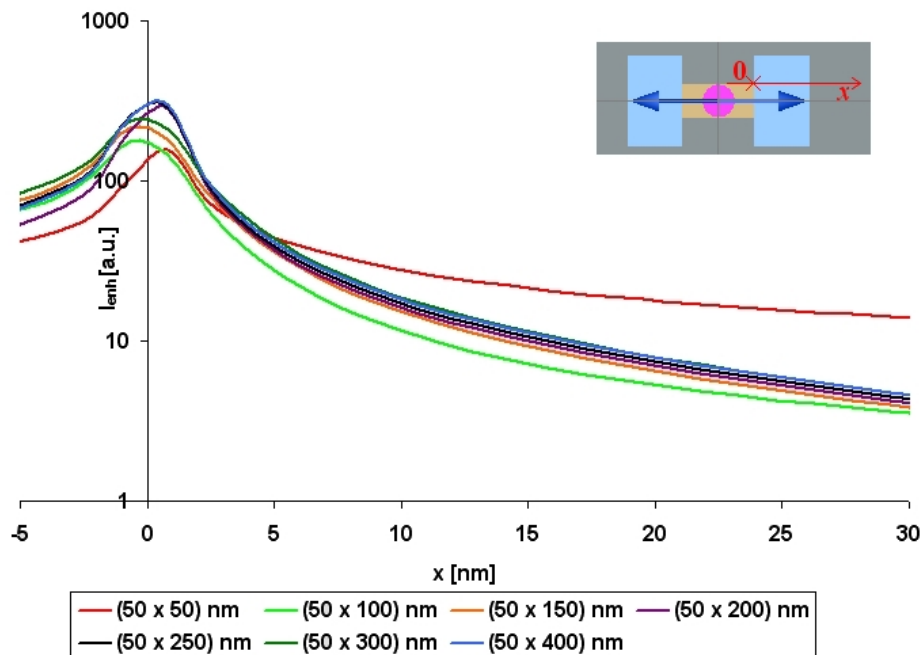


Obrázek 6.20: Mapa normované intenzity elektrického pole I_{enh} v okolí zlaté antény s diamantovými nanotyčemi na čelech. Zesílení elektrického pole na rozhraní NCD-vzduch je způsobeno okrajovými podmínkami na rozhraní dvou prostředí (kapitola 2.1). a) Pohled z boku, rovina xz , $y = 0$ nm, b) pohled shora, rovina xy , $z = 60$ nm.

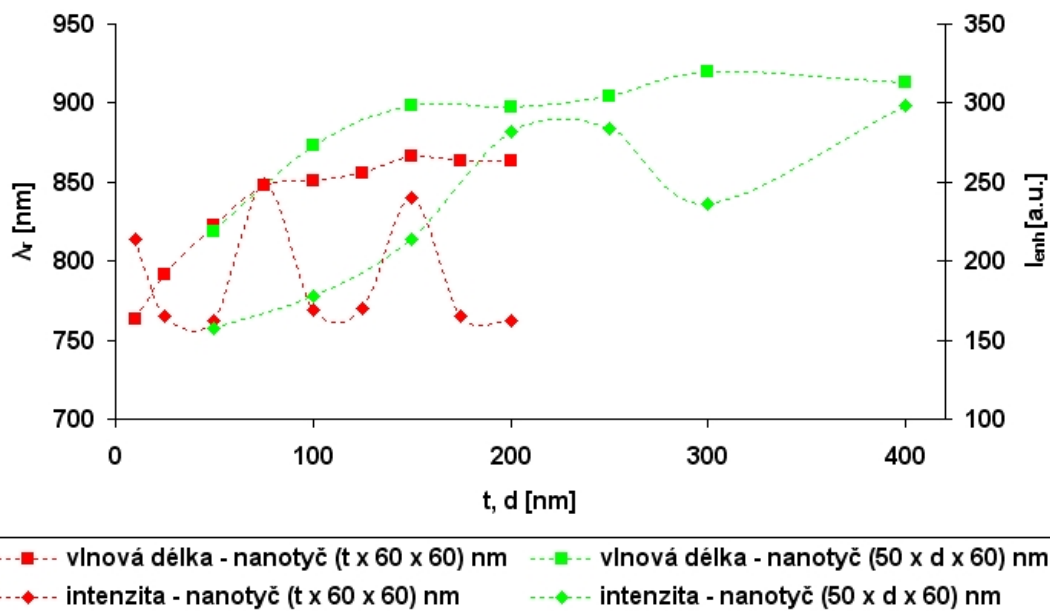


Obrázek 6.21: Normovaná intenzita elektrického pole I_{enh} v blízkosti zlaté antény o rozměrech $(130 \times 60 \times 60)$ nm³. Na čelech antény se nachází diamantové nanotyče o rozměrech $(t \times 60 \times 60)$ nm³. I_{enh} je odečítáno na rozhraní mezi NCD a vzduchem ($z = H = 60$ nm). x označuje vzdálenost od antény. I_{enh} je normována k intenzitě dopadajícího světla. Červený křížek ve vloženém obrázku označuje bod, v němž klademe $x = 0$ a osa x pak body, v nichž odečítáme I_{enh} .

Faktory zesílení intenzity elektrického pole v okolí nanoantény, na rozhraní NCD-vzduch jsou v naprosté většině případů pro nanotyče větší než pro tenké vrstvy NCD. Výjimkami jsou vrstvy NCD o tloušťce 10 nm a NCD vrstva o rozměrech $(250 \times 250 \times 60)$ nm, pro které jsou faktory zesílení intenzity elektrického pole srovnatelné s faktory zesílení pro antény s nanotyčemi. Ovšem NCD vrstvy o tloušťkách okolo 10 nm jsou v praxi nevyrobitelné.



Obrázek 6.22: Normovaná intenzita elektrického pole I_{enh} v blízkosti zlaté antény o rozměrech $(130 \times 60 \times 60) \text{ nm}^3$. Na čelech antény se nachází diamantové nanotyče o rozměrech $(50 \times d \times 60) \text{ nm}^3$. I_{enh} je odečítáno na rozhraní mezi NCD a vzduchem ($z = H = 60 \text{ nm}$). x označuje vzdálenost od antény. I_{enh} je normována k intenzitě dopadajícího světla. Červený křížek ve vloženém obrázku označuje bod, v němž klademe $x = 0$ a osa x pak body, v nichž odečítáme I_{enh} .



Obrázek 6.23: Srovnání rezonanční vlnové délky zlaté antény λ_r a intenzity elektrického pole I_{enh} v okolí antény pro případ, kdy jsou do kontaktu s anténou umístěny diamantové nanotyče o rozměrech $(t \times 60 \times 60)$ a $(50 \times d \times 60) \text{ nm}^3$. I_{enh} je odečítáno v rohu antény na rozhraní mezi NCD a vzduchem ($z = H = 60 \text{ nm}$).

6.5. NANOKRYSTALICKÝ DIAMANT V OKOLÍ ANTÉN

Z obrázku 6.21 je patrné, jak pro NCD tyče délky $t = 10 \text{ nm}$ a $t = 25 \text{ nm}$ dochází poblíž konců tyče ($x = 10 \text{ nm}$ a $x = 25 \text{ nm}$), tedy na rozhraní NCD-vzduch, k zesílení elektrického pole. Za rozhraním elektrické pole opět klesá.

Na obrázku 6.22 vidíme, že intenzita elektrického pole pro nanotyč, jejíž rozměr jsou $(50 \times 50 \times 60) \text{ nm}^3$ nedosahuje v okolí antény takových hodnot jako u tyčí větších rozměrů, avšak intenzita elektrického pole s rostoucí vzdáleností od antény neklesá tak výrazně jako v případě větších nanotyčí. Toto je pravděpodobně způsobeno malým rozměrem tyče, a tedy blízkostí rozhraní NCD-vzduch, kde opět dochází k zesílení elektrického pole.

Na obrázku 6.23 je srovnání rezonančních vlastností antén v přítomnosti nanotyčí. Můžeme si všimnout, že pro nanotyč umístěnou podélně k čelu antény intenzita elektrického pole v rohu antény na rozhraní NCD-vzduch osciluje v závislosti na délce nanotyče. Také pro nanotyč umístěnou podélně k čelu antény, lze pozorovat náznak určité oscilace intenzity.

7. Postup výroby a metoda měření

V této kapitole se zaměříme na to, jakým postupem je možné vyrobit plazmonické nanostruktury, které jsme navrhli a u nichž jsme provedli simulace rezonančních vlastností (kapitola 6). Dále nastíníme metodu, kterou by bylo možné rezonanční vlastnosti těchto nanostruktur změřit.

7.1. Postup výroby plazmonických nanostruktur

Jednou z metod, kterou lze použít k vytvoření plazmonických nanostruktur je elektronová litografie. Na skleněný substrát se nejdříve nanese resist pomocí metody „spin-coating“¹. Jako resistu se obvykle používá polymetylmetakrylát (PMMA). Protože skleněný substrát je nevodivý, dopadem elektronového svazku by se začal nabíjet. Proto se na PMMA pomocí iontového odprašování² (IBS, Ion Beam Sputtering) nebo vakuového napařování nanese tenká vrstva kovu, obvykle chrómu nebo titanu, která bude ze substrátu odvádět náboj. Její tloušťka je obvykle menší než 5 nm.

Do oblasti, kde by měla vzniknout nanoanténa, se následně nechá dopadat elektronový svazek. Po expozici vzorku elektronovým svazkem se chemicky odstraní vrstva chrómu nebo titanu a vzorek se ponoří do vývojky, tvořenou směsí metylizobutylketonu a izopropylalkoholu. PMMA je tzv. pozitivní resist. To znamená, že ve vývojce dojde k rozpuštění té části PMMA, která byla exponovaná elektronovým svazkem.

Následně je celý povrch vzorku opět pokoven tenkou vrstvou chrómu nebo titanu a je na něj nanесena vrstva zlata požadované tloušťky. Vrstva zlata, chrómu a titanu může být vytvořena pomocí IBS nebo vakuovým napařováním z efuzní cely. Přítomnost chrómu nebo titanu zlepšuje přilnavost zlaté vrstvy na substrát. Vrstva zlata se nachází jak na PMMA, tak i na substrátu³.

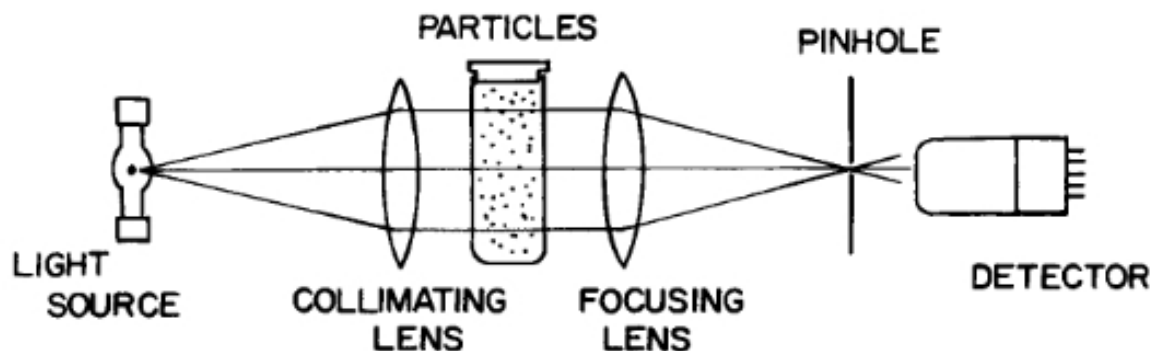
Nakonec je proveden tzv. „lift-off“ proces. Pomocí acetonu, izopropylalkoholu, popřípadě dalších rozpouštědel, je ze substrátu odstraněna vrstva PMMA i s kovem, který se na ní nacházel. Na substrátu se tak nakonec nachází pouze zlatá nanostruktura, která vznikla v oblasti, jež byla exponována elektronovým svazkem.

Proces nanесení vrstvy nanokrystalického diamantu (NCD) je do značné míry podobný procesu tvorby zlaté nanostruktury. Opět je na substrát se zlatou nanostrukturou nanесena vrstva resistu. Na oblast, kde by se měl vyskytovat NCD, se nechá dopadat elektronový svazek, po vyvolání dojde k odstranění resistu z exponované části vzorku. Následně je pomocí plazmatem iniciované chemické depozice z plynné fáze (PE-CVD) na povrch vzorku nanесena vrstva nanokrystalického diamantu. Nakonec je opět proveden „lift-off“ proces a ze vzorku je odstraněna vrstva resistu a NCD, který se na ní nachází. NCD se tak nakonec vyskytuje pouze v oblastech, které byly exponovány elektronovým svazkem.

¹Do středu substrátu se kápne resist a substrát se roztočí kolem své osy do vysokých otáček, resist se vlivem odstředivé síly rovnoměrně rozprostře po substrátu a utvoří tenkou vrstvu.

²Urychlené ionty inertního plynu dopadají na terč, atomy terče jsou odprašovány z povrchu a dopadají na vzorek, kde vytvářejí tenkou vrstvu.

³v oblasti, kde došlo k rozpouštění PMMA ve vývojce následkem expozice elektronovým svazkem



Obrázek 7.1: Schéma experimentálního uspořádání pro měření extinkčních spekter. Převzato z [2].

7.2. Metoda pro měření rezonančních vlastností

Jednou z metod, kterou je možné použít ke studiu lokalizované plazmonové rezonance nanočástic, je extinkční mikroskopie v dalekém poli. Rozhodneme-li se ke studiu rezonančních vlastností nanočástice použít tuto metodu, musíme mít na paměti skutečnost, že rozměry nanočástice jsou mnohem menší než je vlnová délka světla, kterým nanočástici osvětlujeme, a tedy nejmenší možná velikost stopy osvětlujícího pole⁴ je také mnohem větší než jsou rozměry nanočástice.

Abychom tedy mohli extinkční mikroskopii ve vzdáleném poli použít ke studiu rezonančních vlastností, musíme vytvořit pole stejných nanočástic, a zesílit tak extinkční signál. Tím získáme přijatelný poměr mezi extinkčním signálem a šumem. Nanočástice jsou obvykle v takovém poli uspořádány do čtvercové sítě a vzdálenost mezi sousedními částicemi je dostatečně velká, aby se zabránilo vzájemné interakci mezi částicemi [14].

Extinkce se určuje pomocí měření rozdílu mezi intenzitou světla prošlého polem nanočástic a intenzitou světla dopadajícího na toto pole nanočástic. Na obrázku 7.1 je schéma aparatury pro měření extinkčního spektra nanočástic. Světlo vystupující z bodového zdroje je kolimováno objektivem, prochází měřeným vzorkem a je fokusováno dalším objektivem do bodového otvoru na detektoru. V principu takto nelze detekovat žádné jiné světlo, než to, které prošlo vzorkem bez rozptýlení. Ve skutečnosti je rozměr bodové apertury na detektoru konečně malý, takže detektor zaznamenává i světlo rozptýlené pod malým úhlem⁵. Aby bodová apertura umístěná před detektorem účinně bránila dopadu rozptýleného světla do detektoru, musí být její průměr srovnatelný s průměrem difrakční stopy (Airyho disku) v ohniskové rovině fokusačního objektivu.

Umístíme-li ve schématu na obrázku 7.1 za zdroj světla bodovou aperturu, dostaneme konfokální mikroskop. V takovémto případě světlo, které nepochází z ohniska kolimujícího objektivu, neprochází bodovou aperturou před detektorem a není detektorem zaznamenáno. V případě konfokálního uspořádání, musejí osy kolimujícího a fokusačního objektivu splývat s přesností mnohem menší než $\lambda/2$ [19].

Jako detektoru se užívá spektrofotometru, který dokáže během jednoho měření změřit intenzitu extinkce pro všechny vlnové délky, to je zvláště výhodné, pokud nanočástice

⁴daná Rayleigho kritériem $\Delta x = 0,61 \frac{\lambda}{NA}$, kde NA je numerická apertura objektivu [19]

⁵mezni úhel rozptylu detekovatelného světla je určen rozměrem apertury a ohniskovou vzdáleností fokusačního objektivu

7. POSTUP VÝROBY A METODA MĚŘENÍ

osvětluje bílým světlem. Dalším možným typem detektoru je monochromátor v kombinaci s jednofotonovou lavinovou diodou⁶.

Dalšími metodami, které lze použít ke studiu lokalizovaných plazmonových rezonancí je blízkoplní optická spektroskopie a optická mikroskopie v dalekém temném poli [14].

⁶v tomto případě není nutné před lavinovou diodu umisťovat bodovou aperturu, neboť její aktivní oblast je obvykle dostatečně malá

8. Závěr

Tato diplomová práce se zabývala simulacemi rezonančních vlastností zlatých nanoantén nacházejících se na skleněném substrátu. Simulace byly prováděny v komerčním programu Lumerical FDTD Solutions 6.5.0.

V rámci simulací bylo navrženo několik zlatých nanoantén ve tvaru kvádru, které se vzájemně odlišovaly svými rozměry a které byly osvětlovány bílým světlem o vlnové délce 400-800 nm. Na těchto anténách jsme sledovali závislost rezonančního spektra antény na rozměrech antény.

Byly provedeny dvojrozměrné simulace interakce bílého světla s jednou nanoanténou a s nekonečným periodickým polem stejných nanoantén, které bylo vytvořeno pomocí periodických okrajových podmínek. Výsledek těchto simulací ukázal, že periodická struktura pole antén výrazně ovlivňuje rezonanční vlastnosti antén. Ze srovnání rezonančních spekter od jedné antény a od pole antén byl patrný červený posuv rezonanční vlnové délky pro pole antén. Relativní intenzita světla rozptýleného od pole antén byla oproti intenzitě rozptýleného světla od jedné antény vyšší.

Pro zlaté antény různých rozměrů byly provedeny 3D simulace jejich rezonančních spekter. Na výsledcích těchto simulací byla pozorována závislost rezonančních vlastností na rozměrech antény. S rostoucí délkou antén lineárně rostla i rezonanční vlnová délka antén. Intenzita elektrického pole v blízkém okolí antény odečítaná na rozhraní antény a substrátu až na dvě výjimky rostla s délkou antény. S rostoucí šířkou a výškou antény se rezonanční vlnová délka posouvala k menším vlnovým délkám, přičemž vliv šířky antény na tento posuv byl menší než vliv výšky antény. Bylo ukázáno, že závislost intenzity elektrického pole v okolí antény na šířce antény lze popsat mocninou funkcí s exponentem $-3/2$.

Následně bylo sledováno, jak se změní rezonanční vlastnosti těchto nanoantén za přítomnosti nanokrystalického diamantu. Dielektrická funkce nanokrystalického diamantu byla stanovena pomocí Sellmeierovy rovnice. Byly provedeny simulace, kde byly zlaté antény na skleněném substrátu obklopeny tenkou diamantovou vrstvou nebo kde se tenká vrstva diamantu vyskytovala pouze na anténě. Dále byly provedeny simulace antén, na jejichž čelech se nacházely diamantové nanotyče umístěné podélně nebo příčně vůči anténě. S ohledem na možné aplikace ve spektroskopii byla sledována rezonanční vlnové délka antén a intenzita elektrického pole v blízkosti antén na rozhraní diamantu a vzduchu.

Simulace ukázaly, jak jsou rezonanční vlastnosti nanoantén ovlivněny přítomností nanokrystalického diamantu. Rezonanční vlnové délky nanoantén se obecně posouvají k větším hodnotám a faktory zesílení pole v okolí antény jsou v přítomnosti diamantu menší. Nicméně bylo ukázáno, že konkrétní geometrie nanokrystalického diamantu ovlivňuje míru červeného posuvu rezonancí i faktor zesílení pole.

Literatura

- [1] BARNES, W. L., DEREUX, A., EBBESEN, T. W.: *Surface plasmon subwavelength optics*. Nature, vol. 424, 2003, s. 824-830.
- [2] BOHREN, C. F., HUFFMAN, D. R.: *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. John Wiley & Sons, New York, 1983. 476 s. ISBN 0-471-29340-7.
- [3] BRONGERSMA, M. L. et al.: *Plasmonics - the missing link between nanoelectronics and microphotronics*. Appl. Phys. A, 2007, vol. 89, s. 221-223.
- [4] BŘÍNEK, L.: *Plazmonické rezonanční antény*. [Diplomová práce.] Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, Brno, 2008. 90s. Vedoucí diplomové práce prof. RNDr. Tomáš Šíkola, CSc.
- [5] CROZIER, K. B., et al.: *Optical antennas: Resonators for local field enhancement*. J. Appl. Phys., October 2003, vol. 94, no. 7, p. 4632-4642.
- [6] DUB, P., PETRÁČEK, J.: *Vybrané problémy z teorie elektromagnetického pole*. [Učební text]. FSI VUT v Brně, Brno, 2006. 60 s.
- [7] *FDTD Solutions Reference Guide*. Lumerical Solutions, Inc., 2010. 220 s.
- [8] GRIFFITHS, D. J.: *Introduction to Electrodynamics*. Prentice-Hall, New Jersey, 1999. 546 s. ISBN 0-13-805326-X.
- [9] HU, Z. G. et al.: *Optical properties of nanocrystalline diamond films from mid-infrared to ultraviolet using reflectometry and ellipsometry*. J. Mater. Sci.: Mater. Electron, 2007, vol. 18, S37-S41.
- [10] KITTEL, C.: *Introduction to Solid State Physics*. John Wiley & Sons, New York, 1996. 665 s. ISBN 0-471-11181-3.
- [11] KUNZ, K. S., LUEBBERS, R. J.: *Finite Difference Time Domain Method for Electrodynamics*. CRC press, Boca Raton, 1993. 433 s. ISBN 0-8493-8657-8
- [12] KOMRSKA, J.: *Fourierovské metody v teorii difrakce a ve strukturní analýze*. Skriptum VUT. CERM, Brno, 2007. 242 s. ISBN 978-80-214-3532-2.
- [13] KROMKA, A. et al.: *Early stage of diamond growth at low temperature*. Diam. Rel. Mat., 2008, vol. 17, 1252-1255.
- [14] MAIER, S.A.: *Plasmonics: Fundamentals and Applications*. Springer, New York, 2007. 223 s. ISBN 978-0-387-33150-8.
- [15] MAIER, S.A., et al.: *Plasmonics - A Route to Nanoscale Optical Devices*. Adv. Mater., October 2001, vol. 13, no.19, s. 1501-1505.
- [16] MITURA, S. et al.: *Nanocrystalline diamond, its synthesis, properties and applications*. J. Achiev. Mat. Manuf. Eng., May-June 2006, vol. 16, no. 1-2, s. 9-16.

LITERATURA

- [17] MÜHLSCHLEGEL, P., et al.: *Resonant Optical Antennas*. Science, June 2005, vol. 308, s. 1607-1609.
- [18] MUSKENS, O. L. et al.: *Optical Scattering resonances of single and coupled dimer plasmonic nanoantennas*. Optical Express, December 2007, vol. 15, no. 26, s. 17736-17746.
- [19] NOVOTNY, L.: Effective Wavelength Scaling for Optical Antennas. *Phys. Rev. Lett.*, 98, 2007, 266802.
- [20] NOVOTNY, L., HECHT, B.: *Principles of Nano-Optics*. Cambridge Press, New York, 2006. 499 s. ISBN 0-521-83224-1.
- [21] PALIK, E. D.: *Handbook of Optical Constants of Solids*. vol. 1, Academic Press, London, 1985. 805 s. ISBN 0-12-544420-6.
- [22] SCHMIDT, E. et al.: *Optické vlastnosti pevných látek*. SPN, Praha, 1986. 200 s.
- [23] WARD, D. W., NELSON K. A.: *Finite-Difference Time-Domain (FDTD) Simulations of Electromagnetic Wave Propagation Using a Spreadsheet*. Comput. Appl. Eng. Educ., vol. 13, 2005, s. 213-221.
- [24] WEBER, J.: *Handbook of Optical Materials*. CRC press, Boca Raton, 2003. 536 s. ISBN 0-8493-3512-4.
- [25] WILLIAMS, O. A., NESLÁDEK, M.: *Growth and properties of nanocrystalline diamond films*. Phys. Stat. Sol. A, vol. 203, no. 13, s. 3375-3386.
- [26] *FDTD Solutions Online Help. Summary* [online]. c2003-2010. [cit 2010-04-29]. Dostupné na WWW: http://www.lumerical.com/fdtd_online_help/fdtd_online_help_summary.php.
- [27] *FDTD Solutions Online Help. Material database files* [online]. c2003-2010. [cit 2010-05-15]. Dostupné na WWW: http://www.lumerical.com/fdtd_online_help/user_guide_material_list.php

Použité zkratky

CW	Spojitá vlna, Continuous Wave
FDTD	Konečné difference v časové oblasti, Finite Difference Time Domain
IBS	Iontové odprašování, Ion Beam Sputtering
LPP	Lokalizované povrchové plazmony, Localized Surface Plasmons
NCD	Nanokrystalický diamant, Nanocrystalline diamond
OP	Okrajové podmínky
PML	Perfectly Matched Layers
PMMA	Polymethylmetakrylát
PPP	Povrchové plazmonové polaritony, Surface Plasmon Polariton
SERS	Povrchem zesílená ramanovská spektroskopie, Surface Enhanced Raman Spectroscopy